

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. проректора по учебной работе  
Ф.Д. Кодзоева

« 30 » июня 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.01 Физика твердого тела

*(индекс дисциплины по учебному плану, наименование дисциплины (модуля))*

Направление подготовки – 03.03.02 Физика  
*(код, наименование)*

Направленность: Физика

Квалификация выпускника – **Бакалавр**

Форма обучения Очная

г. Магас, 2022

## Цели освоения дисциплины

**Цель курса** «Физика твердого тела» состоит в систематическом изложении способов и методов применения основных принципов квантовой теории к исследованию свойств кристаллических твердых тел.

Студент должен познакомиться с некоторыми методами, применяемыми к описанию наблюдаемых физических явлений и приобрести навыки самостоятельных научных исследований, включая формирование навыков изучения научной физической литературы.

№ п/п	Код профессионального стандарта	Наименование области профессиональной деятельности. Наименование профессионального стандарта
01 Образование и наука		
1.	01.001	Профессиональный стандарт «Педагог (педагогическая деятельность в сфере дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования) (воспитатель, учитель)», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты Российской Федерации от 18 октября 2013 г. № 544н(зарегистрирован Министерством юстиции Российской Федерации 6 декабря 2013 г., регистрационный №30550), с изменением, внесенным приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 5 августа 2016г.№422н (зарегистрирован Министерством юстиции РФ 23 августа2016г., регистрационный № 43326 )
2.	01.003	Профессиональный стандарт «Педагог дополнительного образования детей и взрослых», утвержденный приказом Министерства труда и социальной защиты РФ от 5 мая 2018г. № 298н (зарегистрирован Министерством юстиции РФ 28 августа 2018г., регистрационный № 52016

Формируемые дисциплиной знания и умения готовят выпускника данной образовательной программы к выполнению следующих обобщенных трудовых функций:

Код и наименование профессионального стандарта	Обобщенные трудовые функции			Трудовые функции		
	Код	Наименование	Уровень квалификации	Наименование	Код	Уровень (подуровень) квалификации
01.001 Педагог (педагогическая деятельность в дошкольном, начальном общем, основном общем, среднем общем образовании) (воспитатель, учитель)	А	Педагогическая деятельность по проектированию и реализации образовательного процесса образовательных организациях дошкольного, начального общего, основного общего, среднего общего образования	6	Общепедагогическая функция. Обучение	А/01.6	6
				Воспитательная деятельность	А/02.6	6
				Развивающая деятельность	А/03.6	6
	В	Педагогическая деятельность по проектированию и реализации основных общеобразовательных программ	6	Педагогическая деятельность по реализации программ основного и среднего общего образования	В/03.6	6

## Перечень задач профессиональной деятельности выпускников:

Область профессиональной деятельности (по Реестру Минтруда)	Типы задач профессиональной деятельности	Задачи профессиональной деятельности	Объекты профессиональной деятельности (или области знания)
01 Образование	Педагогический	Разработка и реализация образовательных программ СПО и программ ДО	Образовательные программы и образовательный процесс в системе СПО и ДО
06 Связь, информационные и коммуникационные технологии	Научно-исследовательский	Исследование, разработка, внедрение и сопровождение информационных технологий и систем	Информационные процессы, технологии, системы и сети, их инструментальное (программное, техническое, организационное) обеспечение, способы и методы проектирования, отладки, производства и эксплуатации информационных технологий и систем в различных областях и сферах цифровой экономики

### 2. Место дисциплины в структуре ОПОП бакалавриата

Дисциплина «Физика твердого тела» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 7 семестре.

**Основные навыки**, которыми должен обладать студент: знать основные свойства протяженных систем, обусловленные квантовым характером взаимодействий, обладать навыками работы с объектами, которые характерны для рассматриваемых систем, включая прямое и обратное пространство, операции симметрии, многоэлектронные волновые функции, иметь представление о методах решения многоэлектронных задач, таких, как метод Хартри, Хартри-Фока, Теория Функционала Плотности, а также специальных методах решения задачи о расчете электронной структуры кристаллов, включая, в том числе, и их приближенные варианты – метод сильной связи, метод почти свободных электронов, метод эффективной массы. Указанные навыки должны служить основой для понимания физических основ таких явлений, как электрон-фононное взаимодействие, сверхпроводимость, а также широкого спектра оптических процессов в конденсированном состоянии.

### 3. Результаты освоения дисциплины (модуля) - Физика твердого тела

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению:

Код компетенции	Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции (закрепленный за дисциплиной)	В результате освоения дисциплины обучающийся <b>должен:</b>
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	<p>УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие. Осуществляет декомпозицию задачи.</p> <p>УК-1.2. Находит и критически анализирует информацию, необходимую для решения поставленной задачи.</p> <p>УК-1.3. Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивая их достоинства и недостатки.</p> <p>УК-1.4. Грамотно, логично, аргументированно формирует собственные суждения и оценки.</p> <p>Отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок и т.д. в рассуждениях других участников деятельности.</p> <p>УК-1.5. Определяет и оценивает практические последствия возможных решений задачи.</p>	<p>Знать: Анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие</p> <p>Уметь: Осуществлять поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов</p> <p>Владеть: При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения</p>
ОПК-1	Способен применять базовые знания в области физико-математических и естественных наук в сфере своей профессиональной деятельности.	<p>ОПК-1.1. Обладает базовыми знаниями в области физико-математических наук, необходимыми для решения профессиональных задач.</p> <p>ОПК-1.2. Аргументированно применяет физические законы и математические методы для решения задач теоретического и прикладного характера.</p> <p>ОПК-1.3. Обладает навыками теоретического и экспериментального исследования объектов профессиональной деятельности, решения профессиональных задач в области физики и смежных с ней естественнонаучных дисциплин.</p>	<p>Знает физические основы механики, молекулярной физики, природу колебаний и волн, основы термодинамики, электричества и магнетизма, оптики, основы атомной и ядерной физики, понимает широту и ограниченность применения физики исследованию процессов и явлений в природе и обществе.</p> <p>Умеет использовать теоретические знания при объяснении результатов экспериментов, применять знания в</p>

			<p>области физики для освоения общепрофессиональных дисциплин и решения профессиональных задач, оценивает достоверность полученного решения задачи.</p> <p>Владеет навыками физических исследований, способен передавать результат проведенных исследований в виде конкретных рекомендаций в терминах предметной области знания.</p>
ПК -3	готовностью применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований	<p>ПК-3.1. Понимает физические основы методов и средства преобразования информации, обмена информацией на расстоянии с помощью радиоэлектронных средств и технологий.</p> <p>ПК-3.2. Владеет методологией математического моделирования физических процессов и объектов на базе как стандартных пакетов автоматизированного проектирования и исследований, так и самостоятельно создаваемых оригинальных программ.</p> <p>ПК-3.3. Применяет цифровую технику при обработке данных при соблюдении основных требований информационной безопасности.</p> <p>ПК-3.4. Применяет современные информационные средства при подготовке данных при составлении обзоров, отчетов и научных публикаций.</p>	<p>Владеть: методами нахождения, отбора и объединения различных методов проведения физических исследований.</p> <p>Уметь: осмысленно выбирать научный метод проведения физических исследований.</p> <p>Знать: способы определения видов и типов профессиональных задач, а также методы их решения при проведении физических исследований</p>

#### 4. Структура и содержание дисциплины (модуля)

##### 4.1. Структура дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 зачетных единиц, 252 часа.

№ п/п	Наименование разделов и тем дисциплины (модуля)	семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)									Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)						
			Контактная работа					Самостоятельная работа				Форма промежуточной аттестации (по семестрам)						
			Всего	Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия	Др. виды контакт. работы	Всего	Курсовая работа(проект)	Подготовка к экзамену	Другие виды самостоятельной работы	Собеседование	Коллоквиум	Проверка тестов	Проверка контролльн. работ	Проверка реферата	Проверка эссе и иных творческих работ	курсовая работа (проект) и др.
1	Введение. Основные понятия.	7	8	4	2	2		1		1								
2	Основные положения физики твердого тела.	7	10	4	2	2		1		1	+		+					
3	Квантовая задача многих тел.	7	12	4	2	2		1		1		+	+				+	
4	Адиабатическое приближение.	7	12	4	2	2		1		1		+	+					
5	Одноэлектронное приближение	7	14	4	4	4		2	1	1			+				+	
6	Антисимметризованные волновые функции.	7	14	4	4	4		1	1				+					
7	Теория Функционала Плотности	7	14	4	4	4		1		1			+					
8	Метод Кона-Шэма.	7	14	4	4	4		1	1					+		+		
9	Методы решения уравнений зонной теории.	7	14	4	4	4		2		2							+	
10	Линейные методы.	7	14	4	4	4		2	1	1				+				
11	Приближенные методы.	7	14	4	4	4		1		1				+				
12	Электрон-фононное взаимодействие.	7	14	4	4	4		1		1						+	+	
13	Электрон-фононное взаимодействие в ионных кристаллах.	7	14	4	4	4		1	1				+			+		
14	Сверхпроводимость.	7	14	4	4	4		2	1	1						+	+	
15	Сверхпроводимость: микроскопическая теория .	7	13	4	4	4		1	1			+		+				
16	Оптические свойства кристаллов.	7	12	4	4	4		2	1	1		+		+				
17	Рекомбинационное излучение в полупроводниках.		12	4	4	4		2	1	1								
18	Квантовая теория оптических свойств кристаллов	7	12	4	4	4		2	1	1		+		+				
	<i>Курсовая работа (проект)</i>								*									7
	Общая трудоемкость, в		72	64	64			25		27		Промежуточная						

час																		Форма	
																		Зачет	
																		Зачет с оценкой	
																		Экзамен	+

## 4.2. Содержание тем дисциплины «Физика твердого тела»

### Содержание дисциплины

#### 1. Содержание частей, разделов и тем курса

Тема	Содержание	Литература
1. Введение. Основные понятия.	Трансляционная симметрия, основные векторы трансляций, элементарная ячейка, ячейка Вигнера-Зейтца, обратная решетка, первая зона Бриллюэна, система единиц (атомная, релятивистская)	[1]-[4]
2. Основные положения физики твердого тела.	Периодический потенциал, теорема Блоха, зонная структура, дисперсионная зависимость, классификация твердых тел. Элементарные возбуждения. Квазичастицы	[1]-[4]
3. Квантовая задача многих тел.	Общая формулировка квантовой задачи многих тел. Многоэлектронное уравнение Шредингера, Гамильтониан.	[1]-[4]
4. Адиабатическое приближение.	Разделение атомных и электронных координат.	[1]-[4]
5. Одноэлектронное приближение.	Валентное приближение. Вариационный принцип Ритца. Уравнения Хартри. Самосогласованный потенциал. Решение «самосогласованных» уравнений.	[1]-[4]
6. Антисимметризованные волновые функции.	Определитель Слэтера. Вычисление средних значений с детерминантными функциями. Вариационный принцип. Уравнения Хартри-Фока. Обменная энергия.	[1]-[4]
7. Теория Функционала Плотности	Электронная плотность, определение, основные свойства. Первая теорема Хоэнберга-Кона. Вторая теорема Хоэнберга-Кона, вариационный принцип для электронной плотности. Функционал полной энергии.	[1]-[4]
8. Метод Кона-Шэма.	Построение функционала энергии с использованием фиктивной системы невзаимодействующих частиц. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционная энергия.	[1]-[4]
9. Методы решения уравнений зонной теории	Общая формулировка задачи. Базисные функции. Секулярное уравнение. Метод плоских волн. Метод присоединенных плоских волн. Метод ортогонализированных плоских волн. Псевдопотенциал.	[1]-[6]
10. Линейные методы.	Линеаризация. Линейный метод присоединенных плоских волн (ЛППВ).	[1]-[6]

11. Приближенные методы.	Электрон в пустой решетке. Метод сильной связи. Метод почти свободных электронов. Эффективная масса. Теорема Ванье.	[1]-[6]
11. Электрон-фононное взаимодействие.	Общие свойства взаимодействия электрона с колебаниями решетки. Тензор деформации, локальность. Деформационный потенциал.	[1]-[6]
12. Электрон-фононное взаимодействие.	Гармонический осциллятор. Вторичное квантование, операторы рождения и уничтожения. Понятие полевых операторов. Гамильтониан для частиц с 2-х и 4-х частичным взаимодействиями. Гамильтониан невзаимодействующих фононов. Гамильтониан взаимодействия электронов с фононами в представлении чисел заполнения. Графическое представление, диаграммы Фейнмана. Простейшие типы взаимодействий. Виртуальные фононы.	[1]-[6]
13. Электрон-фононное взаимодействие в ионных кристаллах.	Взаимодействие электрона с деформацией решетки в случае вильной связи. Электрон-фононное взаимодействие в ионных кристаллах. Полярон. Модель Фрелиха.	[1]-[6]
14. Сверхпроводимость	Критическая температура. Эффект Мейснера-Оксенфельда. теория Лондонов. Уравнения Лондонов. Проникновение магнитного поля внутрь сверхпроводника. Теория Гинзбурга-Ландау. Параметр порядка. Уравнения Гинзбурга-Ландау. Длина когерентности. Сверхпроводники 1-го и 2-го рода. Квантование магнитного потока. Флюксон.	[1]-[6]
15. Сверхпроводимость микроскопическая теория.	Электронное притяжение. Куперовские пары. Изотопический эффект.	[1]-[6]
16. Оптические свойства кристаллов	Виды взаимодействия света с твердым телом; оптические константы; поглощение света кристаллами, собственное поглощение; экситонное поглощение; поглощение свободными носителями; примесное поглощение; решеточное поглощение.	[1]-[6]
17. Рекомбинационное излучение в полупроводниках.	Межзонная рекомбинация. Рекомбинация через локализованные центры. Экситонная рекомбинация. Твердотельные лазеры.	[1]-[6]
18. Квантовая теория оптических свойств кристаллов	Общий теоретический анализ межзонных оптических переходов; дипольное приближение; вертикальные переходы; связь с оптическими константами. Оптические свойства кристалла кремния.	[1]-[6]

## 5. Образовательные технологии

№ п.п.	Тема программы дисциплины	Применяемые технологии
1	Основные положения физики твердого тела.	классическое традиционное; лекционное обучение
2	Квантовая задача многих тел.	классическое традиционное; лекционное обучение, наглядные,



		программированные
3	Адиабатическое приближение.	классическое традиционное; лекционное обучение, вербальные (аудио)
4	Одноэлектронное приближение	классическое традиционное; лекционное обучение, самостоятельная работа
5	Антисимметризованные волновые функции.	классическое традиционное; лекционное обучение, самообучение
6	Сверхпроводимость микроскопическая теория.	классическое традиционное; лекционное обучение, дистанционные
7	Оптические свойства кристаллов	классическое традиционное; лекционное обучение, компьютерное программированное обучение
8	Рекомбинационное излучение в полупроводниках.	классическое традиционное; лекционное обучение, компьютерное программированное обучение
9	Квантовая теория оптических свойств кристаллов	классическое традиционное; лекционное обучение, компьютерное программированное обучение

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

**6.1. План самостоятельной работы студентов**

Для получения глубоких и прочных знаний, твёрдых навыков и умений, необходима систематическая самостоятельная работа студента.

В рабочей программе предусмотрена самостоятельная работа для проработки лекционного (теоретического) материала при подготовке к контрольным мероприятиям (в частности к тестированию)

**Самостоятельная работа студентов включает следующие компоненты:**

№	Содержание самостоятельной работы	Кол-во часов	Форма контроля	Отметка о выполнении
4.1	Схема приведенных зон. Периодическая зонная схема.	3	Устное собеседование	
4.2	Поверхность Ферми в металлах с гранецентрированной кубической структурой.	2	Устное собеседование	
4.3	Энергетический спектр электронов в кристалле. Модель Кронига- Пенни	2	коллоквиум	
4.4	Дислокация. Контур и вектор Бюргерса.	2	опрос	
4.5	Неупругое рассеяние фотонов на акустических фононах, неупругое рассеяние нейтронов на фононах, неупругое рассеяние рентгеновских лучей на фононах	4	опрос	
4.6	Виды взаимодействий света с твердым телом.	4	опрос	

Конденсированное состояние вещества. Виды конденсированного состояния. Твердые тела, жидкости и аморфные тела. Структура твердых тел, жидкостей и аморфных тел. Кристаллы. Монокристаллы и поликристаллические вещества.

Симметрические и стационарные состояния кристаллов. Адиабатический принцип. Пространственная решетка кристаллов. Направления в кристалле. Индексы Миллера. Основные типы кристаллических решеток. Ячейка Вигнера – Зейтца. Обратная решетка кристаллов. Трансляционная симметрия кристаллов.

Основы зонной теории твердых тел.

Одноэлектронные состояния в кристалле. Электрон в периодическом поле. Функции Блоха. Свойства волнового вектора электрона в кристалле. Квазиимпульс. Зоны Бриллюэна и поверхность Ферми. Энергия Ферми Энергетические зоны. Металлы, диэлектрики и полупроводники. Эффективная масса электрона. Статистика электронов в твердых телах. Функции распределения Ферми. Химический потенциал.

Дефекты в твердых телах.

Классификация дефектов. Тепловые точечные дефекты. Дефекты по Френкелю. Дефекты по Шоттки. Дислокации. Краевые и винтовые дислокации.

Электрические свойства твердых тел.

Примеси. Донорные и акцепторные примеси. Энергетические уровни примесных атомов в кристалле. Неравновесные электроны и дырки. Рассеяния носителей заряда, проводимость и кинетические свойства металлов, диэлектриков и полупроводников.

Электрон – Фононное взаимодействие.

Фононы. Импульс Фонона. Акустические и оптические фононы. Плазменные волны, плазмоны. Конденсации бозонов. Сверхтекучесть.

Пространственная дисперсия и прохождение света через кристалл.

Взаимодействие света с кристаллической решеткой, поляроны. Полярон Фрелиха. Эффективная масса полярона. Экситоны Френкеля и Ванье. Поляритон. Оптические свойства металлов, диэлектриков и полупроводников. Поверхностные состояния электронов. Состояния электронов в структурах с пониженной размерностью

## 6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Целью самостоятельной работы является самостоятельное приобретение новых знаний и выработка способности к постоянному самообучению и самосовершенствованию в профессиональной и социально-общественных сферах деятельности.

Самостоятельная учебная работа представлена такими формами учебного процесса, как лекция, семинар, практические и лабораторные занятия, экскурсии, подготовка к ним. Студент должен уметь вести краткие записи лекций, составлять конспекты, планы и тезисы выступлений, подбирать литературу и т.д.

Научная самостоятельная работа студента заключается в его участии в работе кружков на кафедрах, в научных конференциях разного уровня, а также в написании контрольных, курсовых и выпускных квалификационных (дипломных работ) работ.

№№ п/п	Наименование работы	Кол-во часов	Форма контроля
1	Проработка лекционного материала	27	Экзамен
2	Подготовка к практическим занятиям	13	Работа у доски; контрольные, самостоятельные работы.
3	Подготовка курсовых работ	12	Допуск к каждой курсовой работе и защита.

### . Вопросы и задания для индивидуальной и самостоятельной работы.

1. Дать определение решетки Бравэ.

2. Какие свойства являются общими для примитивной ячейки и ячейки Вигнера-Зейтца ?  
В чем заключаются их отличия ?
3. Является ли прямая решетка обратной по отношению к своей обратной ?
4. Как вычисляется объем элементарной ячейки ?
5. Как вычисляется объем ячейки Вигнера-Зейтца ?
6. Указать число первых и вторых соседей для простой кубической решетки.
7. Указать число ближайших соседей для гранецентрированной кубической решетки.
8. Указать число ближайших соседей для объемно-центрированной кубической решетки.
9. Изобразить плоскости [100], [110], [111] для простой кубической решетки.
10. За счет каких взаимодействий стабилизируется кристаллическая структура ионных кристаллов.
11. Может ли быть стабильным кристалл, атомы которого взаимодействуют только со своими ближайшими соседями?
12. В чем состоит природа ковалентной связи.
13. Каков механизм водородной связи.
14. Привести примеры «скелетных» кристаллов и указать тип химической связи.
15. Описать природу взаимодействия Ван-дер-Ваальса.
16. Записать основное уравнение динамики решетки в гармоническом приближении.
17. Перечислить основные свойства решений уравнений динамики решетки.
18. В чем состоит отличие акустических колебаний от оптических.
19. Какой тип решеточных колебаний приводит к поляризации кристалла и почему.
20. Указать свойства волновой функции электронов в кристалле.
21. Сформулировать теорему Блоха.
22. Что называется Блоховской функцией?
23. Какие типы квазичастиц могут существовать в кристаллах?
24. В чем состоит механизм образования энергетических зон в кристаллах?
25. Как зонная теория объясняет основное различие металлов и диэлектриков?
26. Изобразить качественно схему энергетических зон полуметалла.
27. Записать соотношение, связывающее вектор скорости электрона и его волновой вектор.
28. Дать определение тензора эффективной массы. Какой вид имеет тензор в кубических кристаллах?
29. Вычислить эффективную массу электрона в одномерном кристалле с законом дисперсии  $E(k) = E_1 + (E_2 - E_1) \sin^2\left(\frac{ak}{2}\right)$ .
30. Вычислить эффективную массу электрона для закона дисперсии  $E(\mathbf{k}) = E_0 - E_1(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) - 3)$ .
31. Дать определение плотности состояний.
32. В чем состоит механизм рассеяния электронов на колебаниях решетки.
33. Перечислить факторы, приводящие к рассеянию электронов в кристалле.
34. Чем отличаются волновая функция поверхностных состояний и волновая функция для идеального кристалла?
35. Перечислить типы дефектов в твердых телах.
36. В чем состоит отличие дефекта по Френкелю от дефекта по Шоттки?
37. Изобразить частотную зависимость диэлектрической проницаемости для диэлектрика с ионной поляризацией и указать поляритонную область.
38. Указать основные свойства сверхпроводящего состояния.
39. Дать качественное описание механизма возникновения сверхпроводимости.
40. Сверхпроводимость: какие факторы указывают на определяющую роль колебаний решетки?

### 6.3. Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов

#### Контрольные задачи.

1. Структура алмаза. Сколько атомов содержится в гранцентрированной кубической элементарной ячейке?

2. Ось симметрия порядка. Кристаллическая решетка не может иметь поворотную ось симметрия пятого порядка. Доказать это утверждение.

3. Определить, какие элементы симметрии имеются в кубе, а также в кубе, грани которого заштрихованы так, что направления штрихов на пересекающихся гранях взаимно перпендикулярны.

4. Определить межплоскостные расстояния в кубической решетке в семействах плоскостей с индексами (100), (110), (111) и (112).

5. Вывести закон зон (закон Вейсса), который гласит: если  $[uvw]$ - ось зоны, а  $(hkl)$  – грань этой зоны, то  $hu + kv + lw = 0$ .

6. Привести выражения для параметров ячеек прямой и обратной решеток всех систем, их межплоскостных расстояний и объемов элементарной ячейки.

7. Показать, что в кубической системе направление  $(hkl)$  перпендикулярно к грани  $(hkl)$ .

8. Доказать, что в кубической системе угол  $\varphi$  между нормальными к граням  $(h_1k_1l_1)$  и  $(h_2k_2l_2)$  определяется формулой:

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}.$$

9. Вывести выражение для энергии Ферми для модели свободных электронов металла при абсолютном нуле температуры.

10. Считая серебро одновалентным металлом со сферической поверхностью Ферми, вычислить следующие величины:

1. энергию Ферми и температуру Ферми;
2. скорость Ферми;
3. среднюю длину свободного пробега электронов при комнатной температуре и вблизи абсолютного нуля температур;
4. объем первой зоны Бриллюэна.

Использовать в расчетах следующие данные для Ag: плотность  $10,5 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$ ; атомный вес  $A=107,87$ ; удельное сопротивление  $\rho = 1,61 \cdot 10^{-6} \text{ ом}\cdot\text{см}$  при  $295^\circ\text{K}$  и  $0,0038 \cdot 10^{-6} \text{ ом}\cdot\text{см}$  при  $20^\circ\text{K}$

11. Электрон движется в одномерном периодическом потенциальном поле, создаваемом атомами, находящимися на расстоянии  $d$  друг от друга.

Показать, что волновые функции электронов могут иметь вид  $u(x) \exp(ikx)$ , где  $u(x)$  – функция той же периодичности, что и потенциал. Предполагая, что в трехмерном случае волновая функция имеет аналогичный вид:  $u(r) \exp(ikr)$ , определить значения волнового вектора  $k$  для гранцентрированной кубической решетки.

12. Зона Бриллюэна ромбической решетки. Пусть ромбическая решетка имеет три примитивных осевых вектора  $a=5x$ ,  $b=2y$ ,  $c=z$ , длина которых выражаются в  $\text{Å}$ . Определить размеры и форму первой зоны Бриллюэна.

13. Показать, что на границах первой зоны Бриллюэна волновые функции свободного электрона в одномерной периодической решетки с периодом  $d$  вырождены. Показать, что если каждый атом вносит малое возмущение, то в первом приближении по возмущению волновые функции на границе зоны пропорциональны.

$$\sin \frac{n\pi x}{d} \quad \text{и} \quad \cos \frac{n\pi x}{d} \quad (n - \text{целое число}).$$

14. Показать, что в случае, когда движение электрона в кристалле можно рассматривать как распространение плоской волны  $\exp(ikr)$ , квант  $\hbar k$  соответствует импульсу. Показать, что если на кристалл действует внешнее электрическое поле, то скорость изменения

импульса в зависимости от времени такова, что электрон может рассматриваться как частица, обратная масса которой является тензорной величиной, имеющей компоненты:

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial k_i \partial k_j}$$

15. Вычислить равновесную концентрацию а) дефектов Шоттки; б) дефектов Френкеля в кристалле.

### Содержание практических и семинарских занятий.

2.а. Перечень вопросов, выносимых на семинарские или практические занятия

1. Структура и симметрия кристаллов. Решетка Бравэ. Основные векторы трансляций.
2. Упаковка атомов в кристаллах. Коэффициент упаковки для решеток Бравэ. Атомные плоскости. Индексы Вейса.
3. Обратная Решетка. Основные векторы трансляций обратной решетки. Зона Бриллюэна.
4. Общие свойства уравнения Шредингера для периодических систем. Теорема Блоха. Блоховские функции.  $k$ -гамильтониан
5. Модель Кронига-Пенни. Энергетические зоны.
6. Метод плоских волн. Периодический потенциал. Зонная структура в методе плоских волн.
7. Основные электронные характеристики: эффективная масса, скорость.
8. Метод сильной связи. Функции Ваннье. Задачи на вычисление дисперсионной зависимости для простых структур.

2.б. Состав и содержание заданий, задач, которые предусмотрены для решения или разбора на занятиях.

#### Занятие 1.

Задача 1. Изобразить структуру кристалла, для которого векторы трансляции ( $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ) и атомный базис ( $A, B$ ) определяются следующим образом:

$$\begin{array}{ll} \mathbf{a}_1 = a(1,0,0) & A = a(0,0,0) = [000] \\ \text{а) } \mathbf{a}_2 = a(0,1,0) & B = a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix} \\ \mathbf{a}_3 = a(0,0,1) & \end{array} \quad \begin{array}{ll} \mathbf{a}_1 = a\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & A = a(0,0,0) = [000] \\ \text{б) } \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) & B = a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix} \\ \mathbf{a}_3 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) & \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \mathbf{a}_1 = a\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & A = a(0,0,0) = [000] \\ \text{в) } \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) & B = a\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 4 & 4 \end{bmatrix} \\ \mathbf{a}_3 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) & \end{array}$$

Задача 2. Определить число атомов в расширенной элементарной ячейке, типа NaCl, имеющей форму куба.

Задача 3. Пусть  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  - векторы трансляций некоторой решетки Бравэ. Определим три вектора

$$\mathbf{u}_1 = l_1 \mathbf{a}_1 + m_1 \mathbf{a}_2 + n_1 \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{u}_2 = l_2 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + n_2 \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{u}_3 = l_3 \mathbf{a}_1 + m_3 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

где  $l_i, m_i, n_i$  - целые числа. Показать, что если

$$\begin{vmatrix} l_1 & m_1 & n_1 \\ l_2 & m_2 & n_2 \\ l_3 & m_3 & n_3 \end{vmatrix} = N,$$

где  $N$  – целое число, то векторы  $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$  образуют некоторый новый набор основных трансляций и найти объем элементарной ячейки, построенной на таких векторах.

Задача 4. Показать, что объемноцентрированная кубическая решетка может быть разделена на две простые кубические решетки А и В так, что ни одна пара ближайших соседей в исходной решетке не окажется в решетке А или В. Показать также, что простая кубическая решетка может рассматриваться как две гранецентрированные, а гранецентрированная как 4 простых.

### Занятие 2.

Задача 1. Для структуры алмаза (сфалерита) найти величину тетраэдрического угла А-В-А.

Задача 2. Найти коэффициент упаковки для простой, объемноцентрированной и гранецентрированной кубической решетки.

### Занятие 3.

Задача 1. Прямым решением уравнения  $(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_k) = 2\pi\delta_{ik}$ , показать, что векторы трансляций обратной решетки определяются формулами:

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_k]}{(\mathbf{a}_1, [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3])},$$

где  $i, j, k$  – циклические перестановки чисел 1, 2, 3.

Задача 2. Показать, что объем первой зоны Бриллюэна  $\tilde{\Omega}_0 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$ , где  $\Omega_0$  - объем элементарной ячейки решетки Бравэ.

Задача 3. Показать, что решетка, обратная к обратной, совпадает с исходной решеткой Бравэ.

### Занятие 4.

Задача 1. Получить правильно нормированные однодетерминантные функции системы из  $N$  частиц с полуцелым спином (ферми-частицы)

Задача 2. Получить правильно нормированные однодетерминантные функции системы из  $N$  частиц с целым спином (бозе-частицы).

Задача 3. Получить выражение для энергии в методе Хартри-Фока через одноэлектронные функции системы  $N$  электронов, находящихся в поле ядер заряда  $Z_J, J = 1, \dots, M$ .

Задача 4. С помощью вариационного метода, используя функционал энергии, получить уравнения Хартри-Фока.

Задача 5. Показать, что уравнение Шредингера для периодической части волновой функции  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  можно записать в виде

$$\left[ \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

где  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ .

### Занятие 5.

Задача 1. Показать, что для одноатомного кристалла, функция, построенная как

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{a}),$$

где  $\varphi(\mathbf{r})$  - функции, локализованные в окрестности узлов решетки, является Блоховской функцией.

Задача 2. Рассмотреть одномерную модель кристалла с потенциалом вида:

$$U(x) = \begin{cases} U_0, & 0 < x < p \\ 0, & -q < x < 0 \end{cases}$$

и периодом решетки  $a = p + q$ . Найти волновые функции, спектр энергий и рассмотреть предельный случай  $p \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$ , так что  $U_0 p = \text{Const}$ .

### Занятие 6.

Задача 1. Используя метод плоских волн, найти спектр энергий в одномерном кристалле для значений волнового вектора на границе зоны Бриллюэна.

Задача 2. Показать, что на границах первой зоны Бриллюэна волновые функции свободного электрона в одномерной решетке с периодом  $d$  вырождены.

Задача 3. Рассмотреть задачу о 2-х мерном электронном газе и

а) показать, что кинетическая энергия электрона в «углу» зоны Бриллюэна в 2 раза больше, чем на середине стороны;

б) найти это отношение для 3-х мерного случая.

### Занятие 7.

Задача 1. Показать, что для любого состояния электрона в кристалле групповая скорость в два раза больше фазовой скорости. Найти соотношение между групповой и фазовой скоростью, если закон дисперсии имеет вид  $\varepsilon(\mathbf{k}) = Ak^2 + Bk^4$ , а также показать, что  $v_{gr} = v_{ph}$ ,

если  $\varepsilon = \frac{2A^2}{9B}$ .

Задача 2. Показать, что для каждой энергетической зоны существует  $2N^3 \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3}$  состояний, приходящихся на единицу объема обратного пространства.

### Занятие 8.

Задача 1. Доказать свойство «трансляции» функций Ваннье для одномерного случая:  $\omega_n(x) = \omega_0(x - na)$ , где  $n$  – номер узла одномерной решетки с периодом  $a$ .

Задача 2. Доказать ортогональность функций Ваннье  $\omega_n(x)$ .

Задача 3. Вычислить функции Ваннье для случая простой кубической решетки, когда Блоховская функция задается плоской волной (электрон в пустой решетке).

Задача 4. Для простой кубической решетки с длиной ребра  $a$  вычислить 4 нижних энергии свободных электронов, если волновой вектор в схеме приведенных зон имеет длину  $\frac{\pi}{2a}$  и перпендикулярен грани куба.

Задача 5. Используя выражение для энергии в методе сильной связи

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + \frac{\sum_{\mathbf{n}} h(\mathbf{n})e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}}}{\sum_{\mathbf{n}} s(\mathbf{n})e^{i\mathbf{k}\mathbf{n}}}$$

где  $\mathbf{n}(n_1 n_2 n_3) = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ , а также считая величины  $h(\mathbf{n}), s(\mathbf{n})$  параметрами, получить в приближении ближайших соседей явные выражения для функции  $\varepsilon(\mathbf{k})$  одноатомного кристалла с ПКР, ОЦК и ГЦК решеткой.

Задача 6. Получить выражение для тензора эффективной массы кристалла с простой кубической решеткой, если спектр энергий имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_a - 2A[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]$$

и найти предельные значения для точки  $\mathbf{k} = 0$ .

### **Организация итоговой аттестации с критериями оценивания:**

Осуществляется в форме экзамена, на котором проверяются знания основных вопросов по (тематика дисциплины).

Оценка "отлично" ставится в случае, если студент покажет глубокое, исчерпывающее понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых процессов и явлений, продемонстрирует умения анализировать ситуации, релевантные задачам его профессиональной квалификации.

Оценка "хорошо" ставится в случае, если студент владеет знаниями теории и практики, показывает достаточное понимание сущности и взаимосвязи рассматриваемых процессов и явлений, но имеет некоторые недостатки в ответах.

Оценка "удовлетворительно" ставится в случае, если отвечающий показывает твердое знание и понимание вопросов программы, но ответы содержат несущественные ошибки и неточности, при ответах рекомендованная литература использована недостаточно.

Оценка "неудовлетворительно" ставится в случае, если имеет место неправильный ответ хотя бы на один из основных вопросов, грубые ошибки в ответе, непонимание сущности излагаемых вопросов, неуверенные неточные ответы на дополнительные вопросы.

### **Экзаменационные вопросы по дисциплине «Физика твердого тела»**

1. Основные понятия физики твердого тела: трансляционная симметрия, решетка Бравэ, основные векторы трансляций, элементарная ячейка, ячейка Вигнера-Зейтца.
2. Основные понятия физики твердого тела: обратная решетка, векторы трансляций обратной решетки, зона Бриллюэна.
3. Основные понятия физики твердого тела: периодический потенциал, теорема Блоха (формулировка), зонная структура.
4. Элементарные возбуждения. Квазичастицы.
5. Общая формулировка квантовой задачи многих тел, многоэлектронное уравнение Шредингера.
6. Адиабатическое приближение. Разделение атомных и электронных координат.
7. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри.
8. Антисимметричные волновые функции. Метод Хартри-Фока.
9. Определение и общие свойства электронной плотности.
10. Теория Функционала Плотности: первая теорема Хоэнберга-Кона.
11. Теория Функционала Плотности: вторая теорема Хоэнберга-Кона, вариационный принцип.
12. Метод Кона-Шэма. Функционал энергии. Обменно-корреляционная энергия.
13. Метод Кона-Шэма, уравнения Кона-Шэма.
14. Методы решения зонных уравнений: базисные функции, секулярное уравнение.
15. Метод плоских волн.
16. Метод ячеек.
17. Метод присоединенных плоских волн: МТ-потенциал.
18. Метод присоединенных плоских волн: решение зонного уравнения.
19. Общая схема линейного метода присоединенных плоских волн.
20. Метод ортогонализированных плоских волн.
21. Псевдопотенциал. Модельные и первопринципные псевдопотенциалы.
22. Электрон в пустой решетке. Зонная структура.
23. Приближение сильной связи: определение и общие свойства функций Ванье.
24. Приближение сильной связи – закон дисперсии, энергетические зоны в методе сильной связи.
25. Модель почти свободных электронов, теория возмущений. Зонная структура в схеме расширенных и приведенных зон.
26. Периодические граничные условия. Вычисление интегралов по зоне Бриллюэна.
27. Плотность состояний, вычисление  $N(E)$  для электрона в пустой решетке.
28. Свойства электронов в кристаллах: эффективная масса электронов и дырок, тензор эффективной массы.
29. Теорема Ванье.



30. Скорость электрона. Уравнения движения.
31. Электрон-фононное взаимодействие: общие свойства, тензор деформации, деформационный потенциал.
32. Вторичное квантование и представление чисел заполнения для деформационного потенциала.
33. Электрон-фононное взаимодействие – гамильтониана взаимодействия, диаграммы Фейнмана, элементарные процессы.
34. Виртуальные фононы.
35. Взаимодействие электронов с деформацией в случае сильной связи.
36. Электрон-фононное взаимодействие в ионных кристаллах. Полярон, модель Фрелиха.
37. Сверхпроводимость: критическая температура, эффект Мейснера-Оксенфельда. Уравнение Лондонов.
38. Сверхпроводимость, проникновение магнитного поля в сверхпроводник.
39. Сверхпроводимость: теория Гинзбурга-Ландау.
40. Сверхпроводимость: длина когерентности, сверхпроводники 1-го и 2-го рода.
41. Квантование магнитного потока. Флюксон.
42. Основные положения микроскопической теории сверхпроводимости.
43. Виды взаимодействия света с твердым телом; оптические константы.
44. Собственное поглощение; экситонное поглощение; поглощение свободными носителями; примесное поглощение; решеточное поглощение.
45. Рекомбинационное излучение в полупроводниках. Межзонная рекомбинация.
46. Рекомбинация через локализованные центры. Экситонная рекомбинация. Твердотельные лазеры.
47. Общий теоретический анализ межзонных оптических переходов. дипольное приближение.
48. Вертикальные переходы, связь с оптическими константами.

## **ТЕМЫ КУРСОВЫХ РАБОТ**

1. Квазикристаллы и аморфные вещества
2. Магнитные свойства тел
3. Нанокристаллы
4. Жидкие кристаллы и их применение
5. Методы определения атомной структуры твердого тела
6. Постоянные магниты. Технология изготовления. Характеристики
7. Тонкие пленки. Получение и свойства
8. Полупроводниковые приборы
9. Жидкие кристаллы и их применение
10. Суперпарамагнетизм и магнитный резонанс
11. Тепловые свойства твердых тел
12. Межатомные связи
13. Современные материалы на основе углерода. Нанотрубки, фуллерены
14. Дефекты кристаллической структуры, влияние деформации на их структуру
15. Влияние водорода на структуру металлических сплавов
16. Принципы моделирования картин рентгеновской дифракции
17. Наноструктуры на основе оксида цинка

## **7. Учебно-методическое и материально-техническое обеспечение дисциплины**

### **7.1. Учебная литература:**

#### *Основная литература*

1. Физика твердого состояния Блэйкмор Дж.2008

2. Введение в физику твердого тела Киттель Ч. 2010
3. Основы физики тв. тела Зиненко В.И., Сорокин Б.П., Турчин П.П. 2008
4. Физика твердого тела Павлов П.В., Хохлов А.В. 2008

#### *Дополнительная литература*

1. Квантовохимические методы в теории тверд. тела Эварестов Р.А. 1982
2. Методы вычислительной физики в теории твердого тела Барьяхтар В.Г., Зароченцев Е.В., Троицкая Е.Г. 1990
3. Физика твердого тела Павлов П.В., Хохлов А.В. 2000
4. Физика полупроводников Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.П. 2009
5. Теория твердого тела. Давыдов А.С. 2008

#### **7.2. Интернет-ресурсы**

1. <http://www.ph4s.ru/books/tvtelo/vasilevskiy.rar>
  2. <http://www.ph4s.ru/books/tvtelo/vasilevskiy.hohlov.rar>
- <http://eqworld.ipmnet.ru/ru/library/physics.htm>  
<http://mat.net.ua/mat/index-fizika.htm>  
[http://ph4s.ru/books\\_phys.html](http://ph4s.ru/books_phys.html)

#### **7.3. Программное обеспечение**

1. Операционная система Microsoft Windows XP Professional.
2. Пакет прикладных программ Microsoft Office 2003 Professional.
3. Программный продукт «Антивирус Касперского».
4. Программный продукт FineReader 7.0 Professional Edition.
5. Программный продукт MATLAB 6.

#### **7.4. Материально-техническое обеспечение**

- ДТА – анализ,
- ЛКТ -8. Определение теплоемкостей и объемной проводимости полимеров.
- Установка для определения электрической прочности диэлектриков.
- Определение диэлектрической проницаемости и тангенса угла диэлектрических потерь.
- Определение показателя преломления и его инкременты растворов полимеров.
- Маятник – копер для исследования прочности полимеров.
- ДИП-определение релаксационных потерь в полимерах.

Рабочая программа дисциплины «Физика твердого тела» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 03.03.02 Физика, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от « 07 » августа 2020 г. № 920.

Программу составил: ст. преподаватель кафедры «Физика» М. Б. Батыжев

Программа одобрена на заседании кафедры «Физика»  
Протокол № 10 от «20» июня 2022 года

Программа одобрена Учебно-методическим советом физико-математического факультета  
Протокол № 10 от «22» июня 2022 года

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета  
Протокол № 10 от « 29 » июня 2022 г.

**Сведения о переутверждении программы на очередной учебный год и регистрации изменений**

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата)	Внесенные изменения	Подпись зав. кафедрой

