

**Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа-Югры
"Сургутский государственный университет"**



20 июня 2019 г., протокол УС №6

МОДУЛЬ "ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА" Физика конденсированного состояния рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой	Экспериментальной физики
Учебный план	b030302-ЦифрТех-19-1.plx 03.03.02 ФИЗИКА Направленность (профиль): Цифровые технологии в геофизике
Квалификация	Бакалавр
Форма обучения	очная
Общая трудоемкость	2 ЗЕТ
Часов по учебному плану	72
в том числе:	
аудиторные занятия	32
самостоятельная работа	40
	Виды контроля в семестрах: зачеты 7

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
	уп	рпд	уп	рпд
Неделя	17,3			
Вид занятий	уп	рпд	уп	рпд
Лекции	16	16	16	16
Практические	16	16	16	16
Итого ауд.	32	32	32	32
Контактная работа	32	32	32	32
Сам. работа	40	40	40	40
Итого	72	72	72	72

Программу составил(и):

д.ф.-м.н, профессор Ельников А.В.



Рабочая программа дисциплины

Физика конденсированного состояния

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования по направлению подготовки 03.03.02 (уровень бакалавриата) (приказ Минобрнауки России от 07.08.2014г. №937)

составлена на основании учебного плана:

03.03.02 ФИЗИКА

Направленность (профиль): Цифровые технологии в геофизике

утвержденного учёным советом вуза от 20 июня 2019 г., протокол УС №6

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Экспериментальной физики

Протокол от 17 05 2019 г. № 03/70

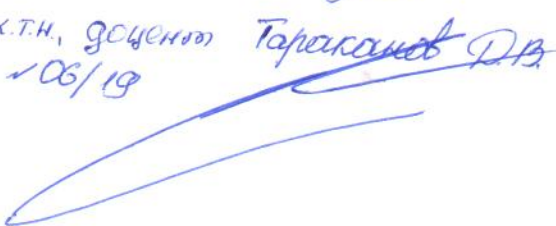
Срок действия программы: - уч.г.

Зав. кафедрой д.ф.-м.н, профессор Ельников А.В.



Председатель УМС к.т.н, доцент Тараканов Д.В.

07 06 2019 г.



1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	
1.1	Целью освоения дисциплины «Физика конденсированного состояния» (ФКС) является:
1.2	- изучение физических основ, методов, законов и моделей физики конденсированного состояния;
1.3	- ознакомление со структурой и классификацией твердых тел, квантово-механическим описанием их физических свойств и характеристик.
1.4	- приобретение навыков использования знаний физики конденсированного состояния в профессиональной деятельности.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП	
Цикл (раздел) ООП:	Б1.Б.08
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
2.1.1	Дифференциальные уравнения
2.1.2	Математический анализ
2.1.3	Модуль "Общая физика"
2.2	Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
2.2.1	Телекоммуникационные системы в геофизике
2.2.2	Сейсмические и акустические методы исследования
2.2.3	Геодинамика и математическое моделирование

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)	
ОК-6: способностью работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	
ОК-7: способностью к самоорганизации и самообразованию	
ОПК-3: способностью использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач	

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1	Знать:
3.1.1	Методы коллективной работы в условиях конфессиональных особенностей;
3.1.2	принципы самоорганизации систем и основные термодинамические и кинетические характеристики предмета исследований;
3.1.3	фундаментальные законы и разделы физики конденсированного состояния;
3.1.4	особенности квантово-механического описания квазичастичных возбуждений в конденсированных средах;
3.1.5	модели коллективных и связанных состояний и их возбуждений в твердых телах;
3.1.6	современные направления исследований по физике конденсированного состояния
3.2	Уметь:
3.2.1	Работать в коллективе, решаящую единую профессиональную задачу;
3.2.2	самостоятельно ставить задачи и решать поставленные исследовательские проблемы;
3.2.3	применять современные методы теории конденсированного состояния к решению задач;
3.2.4	выделять конкретное физическое содержание в прикладных задачах будущей деятельности и формулировать задачи; использовать полученные знания при решении профессиональных задач, связанных со свойствами конденсированного состояния;
3.3	Владеть:
3.3.1	Навыками решения стандартных задач профессиональной деятельности при работе в коллективе;
3.3.2	Методиками проведения библиографических исследований, самостоятельного проведения инструментальных измерений;

3.3.3	Методами и методиками решения задач механики сплошных сред;
3.3.4	Навыками работы с научной литературой и интернетом, системным научным анализом проблем (как природных, так и профессиональных) различного уровня сложности;
3.3.5	Навыками работы с лабораторным оборудованием и современной научной аппаратурой проведения физического эксперимента.

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Инте факт.	Примечание
	Раздел 1. Введение в физику конденсированных сред						
1.1	Классификация типов связей. Ионная связь: зависимость потенциальной энергии от расстояния, результирующая энергия взаимодействия ионов, результирующая энергия решетки. Ковалентная связь: обобществление электронов. Металлическая связь. Водородная связь /Лек/	7	2	ОК-7 ОКП-3	Л1.1 Л1.2 Э1	0	
1.2	Кристаллическая решетка. Определение индексов Миллера /Пр/	7	3	ОК-6 ОК-7 ОКП-3	Л1.3Л2.1Л3.1 Э1	0	Решение задач
1.3	Сила Ван-дер-Ваальса: дисперсионное взаимодействие, ориентационное взаимодействие, индукционное взаимодействие /Ср/	7	6	ОК-7 ОКП-3	Л1.3Л3.2 Э1	0	Подготовка к практическому занятию
	Раздел 2. Элементы кристаллографии						
2.1	Кристаллическая решетка. Решетки Бравэ. Трансляции. Элементарная ячейка. Узлы решетки. Простые и сложные элементарные ячейки. Типы сложных элементарных ячеек (объемноцентрированные, гранецентрированные, базоцентрированные), решетки с базисом. Обозначение узлов, направлений и плоскостей в кристалле. Классификация твердых тел по характеру сил связи. Дефекты по Френкелю, дефекты по Шоттки, примеси /Лек/	7	3	ОК-7 ОКП-3	Л1.1 Л1.2 Э1	0	
2.2	Кристаллическая решетка. Типы элементарных кристаллических ячеек /Пр/	7	3	ОК-6 ОК-7 ОКП-3	Л1.3Л2.1Л3.1 Э1	0	Решение задач
2.3	Упругие свойства. Расчет тензора упругих напряжений /Ср/	7	6	ОК-7 ОКП-3	Л1.3 Э1	0	Подготовка к практическому занятию
	Раздел 3. Зонная теория твердых						
3.1	Обобществление электронов в кристаллов. Энергетический спектр электронов в кристалле. Зависимость энергии электрона от волнового вектора. Эффективная масса электрона. Проводники, диэлектрики и полупроводники. /Лек/	7	4	ОК-7 ОКП-3	Л1.2Л2.3 Л2.4Л3.3 Э1	0	
3.2	Электроны в твердом теле. Расчет энергии Ферми. Определение концентрации носителей заряда. /Пр/	7	3	ОК-6 ОК-7 ОКП-3	Л1.1Л2.1 Л2.2Л3.1	0	Решение задач

3.3	Понятие о нормальных колебаниях решетки. Спектр нормальных колебаний решетки. Характеристическая дебаевская частота. Характеристическая температура Дебая. Понятие о фононах. /Ср/	7	6	ОК-7 ОПК-3	Л1.3 Э1	0	Подготовка к практическому занятию
Раздел 4. Электропроводность твердых тел							
4.1	Дрейф электронов под действием внешнего поля. Время релаксации и длина свободного пробега. Удельная электропроводность проводника. Электропроводность чистых металлов. Собственная проводимость полупроводников. Примесная проводимость полупроводников. /Лек/	7	3	ОК-7 ОПК-3	Л1.2 Э1	0	
4.2	Электроны в твердом теле. Расчет электропроводности и контактной разности потенциалов /Пр/	7	3	ОК-6 ОК-7 ОПК-3	Л1.1 Л1.3Л2.1Л3.1 Э1	0	Решение задач
4.3	Собственные полупроводники. Понятие о дырках. Примесные полупроводники. Положение уровня Ферми и концентрация свободных носителей в полупроводниках. /Ср/	7	6	ОК-7 ОПК-3	Л1.3 Э1	0	Подготовка к практическому занятию
4.4	/Контр.раб./	7	0			0	
Раздел 5. Контактные явления							
5.1	Работа выхода. Влияние абсорбционных слоев на работу выхода. Контакт двух металлов. Контактная разность потенциалов. Контакт металла с полупроводником. Запорный слой. Влияние контактного поля на энергетические уровни полупроводника. Выпрямление на контакте полупроводника с металлом. Контакт двух полупроводников с различным типом проводимости. Равновесное состояние р-п-перехода. Выпрямляющее действие р-п-перехода. Вольтамперная характеристика р-п-перехода /Лек/	7	2	ОК-7 ОПК-3	Л1.2 Э1	0	
5.2	Функция распределения Ферми-Дирака металлы Электронно-дырочный переход /Пр/	7	2	ОК-6 ОК-7 ОПК-3	Л1.1Л2.1 Э1	0	Решение задач
5.3	/Контр.раб./	7	0			0	
5.4	Толщина двойного электрического слоя, возникающего в месте контакта двух металлов /Ср/	7	8	ОК-7 ОПК-3	Л1.3Л3.1 Э1	0	Подготовка к практическому занятию
Раздел 6. Магнитные свойства твердых тел							

6.1	Магнитное поле в магнетиках. Магнитные свойства твердых тел. Магнитные свойства атомов. Природа диамагнетизма. Природа парамагнетизма. Природа ферромагнетизма. Роль обменного взаимодействия в возникновении ферромагнетизма /Лек/	7	2	ОК-7 ОПК-3	Л1.2 Э1	0	
6.2	Оптические свойства. Определение фотоиндуцированного напряжения на p-n-переходе /Пр/	7	2	ОК-6 ОК-7 ОПК-3	Л1.1Л2.1 Э1	0	Решение задач
6.3	Тема 9. Доменная структура ферромагнитных тел. Качественный анализ кривой намагничивания. /Ср/	7	8	ОК-7 ОПК-3	Л1.3Л3.1 Э1	0	Подготовка к практическому занятию
	Раздел 7. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ						
7.1	/Зачёт/	7	0	ОК-6 ОК-7 ОПК-3	Л1.1 Л1.2 Л1.3	0	

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

5.1. Контрольные вопросы и задания

Приложение № 1

5.2. Темы письменных работ

Приложение № 1

5.3. Фонд оценочных средств

Приложение № 1

5.4. Перечень видов оценочных средств

Решение задач. Зачет

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Матухин В. Л., Ермаков В. Л.	Физика твердого тела: учебное пособие	СПб. [и др.]: Лань, 2010	6
Л1.2	Епифанов Г. И.	Физика твердого тела: учебное пособие	СПб. [и др.]: Лань, 2010	5
Л1.3	Гуртов В. А., Осауленко Р. Н., Алешина Л. А.	Физика твердого тела для инженеров: Учебное пособие	Москва: Техносфера, 2012, http://www.iprbookshop.ru/26903	1

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Бушманов Б. Н., Хромов Ю. А.	Физика твердого тела: Учеб. пособие для студ. ВУЗов	М.: Высшая школа, 1971	20
Л2.2	Геринг Г. И., Панова Т. В.	Физика конденсированного состояния вещества: Учебное пособие	Омск: Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 2008, http://www.iprbookshop.ru/24954	1

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.3	Черевко А.Г.	Физика конденсированного состояния. Часть 1. Кристаллы и их тепловые свойств: учебное пособие	Новосибирск: Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 2016, http://www.iprbookshop.ru/69566.html	1
Л2.4	Черевко А. Г.	Физика конденсированного состояния. Часть 1. Кристаллы и их тепловые свойств: Учебное пособие	Новосибирск: Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 2016, http://www.iprbookshop.ru/69566.html	1

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л3.1	Табарин В. А., Иконников В. П.	Физические основы электроники: (Лабораторный практикум)	Сургут: Издательство СурГУ, 2004	179
Л3.2	Анфимов И. М., Кобелева С. П., Щемеров И. В.	Физика конденсированного состояния. Электронная структура твердых тел: Лабораторный практикум	Москва: Издательский Дом МИСиС, 2014, http://www.iprbookshop.ru/56588.html	1
Л3.3	Черевко А. Г., Гулидов А. И.	Физика конденсированного состояния. Лабораторный практикум: Методическое пособие	Новосибирск: Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 2017, http://www.iprbookshop.ru/78151.html	1

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1 Государственная публичная научно-техническая библиотека России (ГПНТБ России)

6.3.1 Перечень программного обеспечения

6.3.1.1 Microsoft Office

6.3.2 Перечень информационных справочных систем

6.3.2.1 <http://www.garant.ru/> Информационно-правовой портал Гарант.ру

6.3.2.2 <http://www.consultant.ru/> Справочно-правовая система Консультант Плюс

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1 Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (практических занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены: типовой учебной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
Приложение к рабочей программе по дисциплине

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Квалификация выпускника	Бакалавр
Направление подготовки	<u>03.03.02</u> <u>Физика</u>
Направленность (профиль)	Цифровые технологии в геофизике
Форма обучения	очная
Кафедра-разработчик	Кафедра экспериментальной физики
Выпускающая кафедра	Кафедра экспериментальной физики

Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

Этап: проведение текущего контроля успеваемости по дисциплине «Физика конденсированного состояния»

Типовые задачи и их решения к текущему контролю:

Раздел 1. Введение в физику конденсированных сред

<p>Задача 1. Пусть энергия частицы в поле другой частицы зависит от расстояния между центрами этих частиц следующим образом: где α и β - постоянные Показать, что: 1. Эти две частицы образуют стабильное соединение при $r = r_0 = (8\beta/\alpha)^{1/7}$; 2. В случае образования стабильной конфигурации энергия притяжения в 8 раз больше энергии отталкивания; 3. Полная потенциальная энергия двух частиц при стабильной конфигурации: 4. Если разделять частицы, то молекула разорвется, как только будет достигнуто расстояние R:</p>	$U(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{\beta}{r^8}$ $U_{\text{ст}} = -\frac{7}{8} \left(\frac{\alpha^8}{8\beta} \right)^{1/7} = -\frac{7}{8} \frac{\alpha}{r_0}$ $R = \left(\frac{36\beta}{\alpha} \right)^{1/7} = 4,5^{1/7} r_0$
<p>Решение 1. В состоянии равновесия</p>	$\left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\alpha}{r_0^2} - \frac{8\beta}{r_0^9} = 0$ $\Rightarrow r_0 = \left(\frac{8\beta}{\alpha} \right)^{1/7}$
<p>2. Энергия притяжения энергия отталкивания</p>	$U_{\text{пр}} = -\frac{\alpha}{r_0} = -\alpha \left(\frac{\alpha}{8\beta} \right)^{1/7}$ $U_{\text{от}} \frac{\beta}{r_0^8} = \beta \left(\frac{\alpha}{8\beta} \right)^{8/7} = \frac{\alpha}{8} \left(\frac{\alpha}{8\beta} \right)^{1/7}$
<p>Сравнивая $U_{\text{пр}}$ и $U_{\text{от}}$, получим $U_{\text{пр}} = 8 U_{\text{от}}$</p>	
<p>3. Полная энергия</p>	$U = U_{\text{пр}} + U_{\text{от}} = -\alpha \left(\frac{\alpha}{8\beta} \right)^{1/7} + \frac{\alpha}{8} \left(\frac{\alpha}{8\beta} \right)^{1/7} = -\frac{7}{8} \alpha \left(\frac{\alpha}{8\beta} \right)^{1/7} = -\frac{7}{8} \frac{\alpha}{r_0}$
<p>4. Молекула будет разорвана при максимальной силе F_{max}. Так как уравнения $\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = 0$ находим межатомное расстояние, соответствующее максимальной силе:</p>	<p>то из $F = -\frac{\partial U}{\partial r}$, то из</p>

$$\frac{dU}{dr} = \frac{\alpha}{r^2} - \frac{8\beta}{r^9}; \quad \frac{d^2U}{dr^2} = -\frac{2\alpha}{r^3} + \frac{72\beta}{r_{\max}^{10}} = 0; \quad \text{тогда} \quad r_{\max} = \left(\frac{36\beta}{\alpha}\right)^{1/7} = 4,5^{1/7} r_0$$

Задача 2 Энергия одномерного молекулярного кристалла в расчете на один атом представляется выражением

$$u(x) = A \left[\left(\frac{\sigma}{x}\right)^{12} - 2\left(\frac{\sigma}{x}\right)^6 \right],$$

где x – расстояние между соседними атомами, A и σ – постоянные. Найти равновесное межатомное расстояние x_0 , энергию связи в расчете на один атом и коэффициент сжимаемости χ

Решение.

Пусть кристалл содержит N атомов, тогда его энергия $U(x) = N u(x)$. Равновесное межатомное расстояние x_0 соответствует минимуму энергии взаимодействия, поэтому его можно найти из условия:

$$\left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=x_0} = \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x_0} = N \left(\frac{du}{dx} \right)_{x_0} = 0.$$

Продифференцировав выражение для $u(x)$ из условия задачи, получим, что $x_0 = \sigma$. Отсюда энергия связи в равновесном состоянии в расчете на один атом: $u_0 = u(x_0) = -A$.

$$B = V \frac{d^2U}{dV^2}$$

Сжимаемость $\chi = 1/B$, где B – объемный модуль упругости. Пусть кристалл содержит N атомов, тогда $V_0 = Nx_0$ – длина цепочки атомов («объем» кристалла в одномерном случае).

Задача 3. Экспериментальное значение энергии сцепления KCl на одну молекулу

$$U_{\text{равн}} = U(r_0) = 7.3 \text{ эВ}, \quad r_0 = 3.1 \text{ \AA}.$$

$$U(r) = -\frac{e^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}, \quad \text{найти } n.$$

Воспользовавшись выражением для энергии связи

Решение В выражении для энергии связи два неизвестных: B и n . С учетом уравнения

$$\left. \frac{dU(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = \frac{e^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0,$$

имеем систему:

$$\begin{cases} \frac{e^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0, \\ -\frac{e^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 r_0} + \frac{B}{r_0^n} = U_{\text{равн}}. \end{cases}$$

Решение дает:

$$\frac{1}{n} = 1 + \frac{4\pi\epsilon_0 r_0 U_{равн}}{\alpha e} \approx 0.102 \Rightarrow n \approx 9.8.$$

Заметим, что для большинства ионных кристаллов показатель степени n в потенциале сил отталкивания изменяется в пределах 6–10.

Раздел 2. Элементы кристаллографии.

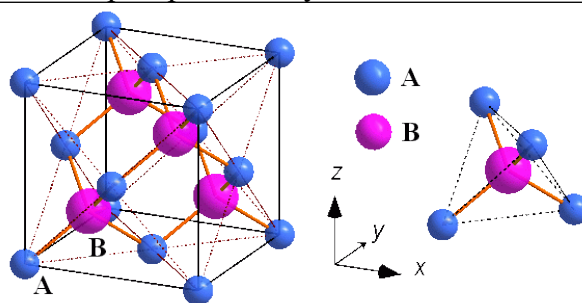
Задача 1. Для структуры алмаза (сфалерита) найти тетраэдрический угла $A-B-A$.

Решение.

Из рисунка видно, что величину тетраэдрического угла (между направленными связями в структуре алмаза) можно вычислить из соотношения

$$\cos \frac{\varphi_t}{2} = \frac{a}{a\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}}, \text{ что дает значение}$$

$$\varphi_t = 109^\circ 28'.$$



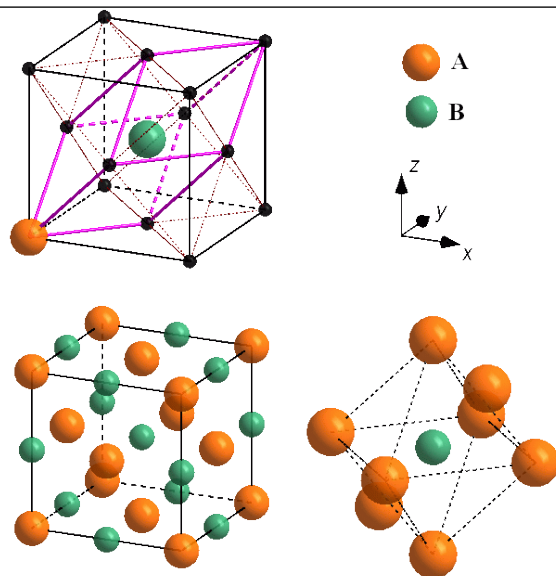
Задача 2. Определить число атомов в расширенной элементарной ячейке, изображенной на рис.3.

Решение. Объем примитивной ячейки ГЦК решетки, согласно определению основных векторов трансляций, составляет:

$$\Omega_0 = (\mathbf{a}_1, [\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3]) = \begin{vmatrix} 0 & a/2 & a/2 \\ a/2 & 0 & a/2 \\ a/2 & a/2 & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}.$$

В структуре NaCl на этот объем приходится два атома. Как видно из рис.3, объем расширенной элементарной ячейки (РЭЯ) $\Omega_a = a^3$.

Поскольку число атомов в какой-либо области кристалла пропорционально ее объему, то число атомов в ячейке, изображенной на рис. 3, составляет $4 \times 2 = 8$



Задача 3. Найти индексы плоскостей, проходящих через узловые точки кристаллической решетки с координатами 9; 10; 30, если параметры решетки $a=3$, $b=5$ и $c=6$.

Решение

Из кристаллографии следует, что:

$$h : k : l = \frac{a}{A} : \frac{b}{B} : \frac{c}{C}, \quad (2.12)$$

где h, k, l - индексы Миллера. Тогда:

$$h : k : l = \frac{3}{9} : \frac{5}{10} : \frac{6}{30} = \frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{5} = 10 : 15 : 6$$

Таким образом, искомые индексы плоскости (10 15 6).

ОТВЕТ: Индексы плоскости (10 15 6).

Раздел 3. Зонная теория твердых тел.

Задача 1. Получить выражение для обменно-корреляционного потенциала в локальном

приближении для обменно-корреляционной энергии $E_{xc}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}(\rho; \mathbf{r}) d\mathbf{r}$.

Решение

Обменно-корреляционный потенциал определяется как вариационная производная

$$\begin{aligned} v_{xc}(\rho; \mathbf{r}) &= \frac{\delta E_{xc}(\rho; \mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r})} = \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} \int \rho(\mathbf{r}') \varepsilon_{xc}(\rho; \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \\ &= \int \left[\frac{\delta \rho(\mathbf{r}')}{\delta \rho(\mathbf{r})} \varepsilon_{xc} + \rho(\mathbf{r}') \frac{d\varepsilon_{xc}}{d\rho(\mathbf{r}')} \frac{\delta \rho(\mathbf{r}')}{\delta \rho(\mathbf{r})} \right] d\mathbf{r}'. \end{aligned}$$

Используя свойства вариационных производных $\frac{\delta f(\mathbf{x})}{\delta f(\mathbf{x}')} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$, получаем выражение для обменно-корреляционного потенциала:

$$v_{xc}(\rho; \mathbf{r}) = \varepsilon_{xc}(\rho; \mathbf{r}) + \rho(\mathbf{r}) \frac{d\varepsilon_{xc}(\rho; \mathbf{r})}{d\rho(\mathbf{r})}.$$

Задача 2. 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 $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Решение. Общий вид волнового уравнения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Вычислим действие оператора $\hat{\mathbf{p}}^2$, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ на функцию $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \hat{\mathbf{p}} \cdot \left[-i\hbar \nabla e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] = \hat{\mathbf{p}} \cdot \left[\hbar \mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - i\hbar e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \nabla u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] = \\ &= \hat{\mathbf{p}} \cdot \left[\hbar \mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[(\hbar \mathbf{k})^2 + 2\hbar \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}^2 \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \\ &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{k})^2 u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Подставляя данное выражение в уравнение Шредингера, после сокращений получим требуемый результат. Полученное уравнение можно переписать в несколько иной форме:

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

Обозначая

$$\hat{\mathbf{H}}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{H}}' = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad \varepsilon'(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m},$$

получим

$$[\hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{H}}'] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon'(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

где $\hat{\mathbf{H}}'$ называется $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ -гамильтонианом. Такая форма уравнения удобна для анализа решений в окрестности, например, экстремальных точек функции $\varepsilon'(\mathbf{k})$ с помощью методов теории возмущений.

Раздел 4. Электропроводность твердых тел

Задача 1 Кубический кристалл подвергнут растяжению в направлении [100]. Найти выражение для коэффициента Пуассона через упругие постоянные или модули упругости.

Решение Закон Гука для анизотропного тела записывается таким образом:

$$\begin{aligned} S_1 &= s_{11} T_1 + s_{12} T_2 + s_{13} T_3 + s_{14} T_4 + s_{15} T_5 + s_{16} T_6; \\ S_2 &= s_{21} T_1 + s_{22} T_2 + s_{23} T_3 + s_{24} T_4 + s_{25} T_5 + s_{26} T_6; \\ S_3 &= s_{31} T_1 + s_{32} T_2 + s_{33} T_3 + s_{34} T_4 + s_{35} T_5 + s_{36} T_6; \\ S_4 &= s_{41} T_1 + s_{42} T_2 + s_{43} T_3 + s_{44} T_4 + s_{45} T_5 + s_{46} T_6; \\ S_5 &= s_{51} T_1 + s_{52} T_2 + s_{53} T_3 + s_{54} T_4 + s_{55} T_5 + s_{56} T_6; \\ S_6 &= s_{61} T_1 + s_{62} T_2 + s_{63} T_3 + s_{64} T_4 + s_{65} T_5 + s_{66} T_6; \end{aligned}$$

Для кубического кристалла закон Гука записывается таким образом:

$$\begin{aligned} S_1 &= s_{11} T_1 + s_{12} T_2 + s_{12} T_3; \\ S_2 &= s_{12} T_1 + s_{11} T_2 + s_{12} T_3; \\ S_3 &= s_{12} T_1 + s_{12} T_2 + s_{11} T_3; \\ S_4 &= s_{44} T_4; \\ S_5 &= s_{44} T_5; \\ S_6 &= s_{44} T_6; \end{aligned}$$

Если существуют напряжения растяжения только вдоль оси [100], то лишь $T_1 \neq 0$. Тогда:

$S_1 = s_{11} T_1$; $S_2 = s_{12} T_1$; $S_3 = s_{12} T_1$. Так как коэффициент Пуассона $\nu = -S_2/S_1$, то следует, что: $\nu = -s_{12}/s_{11}$.

ОТВЕТ: $\nu = -s_{12}/s_{11}$.

Задача 2 Кубический кристалл подвергнут гидростатическому сжатию. Показать, что величина обратная сжимаемости $B = -V(dP/dV)$, связана с упругими постоянными соотношением $B = (c_{11} + 2c_{12})/3$.

Решение

В общем случае закон Гука для анизотропного тела записывается следующим образом: $S_q = s_{qr} T_r$ ($q, r = 1, 2, 3, 4, 5, 6$), где S_q - компоненты тензора деформации, T_r -компоненты тензора напряжения. При гидростатическом сжатии $T_1 = T_2 = T_3 = -P$ и $T_4 = T_5 = T_6 = 0$. Тогда закон Гука переписывается таким образом:

$$\begin{aligned} S_1 &= -(s_{11} + s_{12} + s_{13}) P, \\ S_2 &= -(s_{12} + s_{22} + s_{23}) P, \\ S_3 &= -(s_{13} + s_{23} + s_{33}) P, \end{aligned}$$

$$S_4 = -(s_{14} + s_{24} + s_{34}) P,$$

$$S_5 = -(s_{15} + s_{25} + s_{35}) P,$$

$$S_6 = -(s_{16} + s_{26} + s_{36}) P.$$

Объемная деформация определяется суммой $S_1 + S_2 + S_3$. Тогда:

$$S_1 + S_2 + S_3 = -[s_{11} + s_{22} + s_{33} + 2(s_{12} + s_{23} + s_{13})] P.$$

Так как для кубических кристаллов $s_{11} = s_{22} = s_{33}$ и $s_{12} = s_{23} = s_{13}$, то сжимаемость:

$$\alpha = -(S_1 + S_2 + S_3) / P = 3(s_{11} + 2s_{12}).$$

Поскольку: $c_{11} + 2c_{12} = 1 / (s_{11} + 2s_{12})$, то $B = 1 / \alpha = (c_{11} + 2c_{12}) / 3$.

ОТВЕТ: $B = (c_{11} + 2c_{12}) / 3$.

Раздел 5. Контактные явления

Задача 1

Определить величину квазиимпульса фонона, соответствующего частоте $\omega = 0,1\omega_{\max}$. Усредненное значение скорости звука в кристалле $\langle v \rangle = 1380$ м/с, характеристическая температура Дебая $\theta_D = 100$ К. Дисперсией звуковых волн в кристалле пренебречь.

Решение. Квазиимпульс фонона может быть вычислен по формуле:

$$P = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \hbar K$$

При отсутствии дисперсии звуковых волн волновое число может быть определено из

формулы: $K = \frac{\omega}{\langle v \rangle}$. Тогда импульс фонона можно записать:

$$P = \frac{\hbar\omega}{\langle v \rangle} = \frac{\hbar \cdot 0,1\omega_{\max}}{\langle v \rangle} = \frac{\hbar \cdot 0,1 K(\theta_D / \hbar)}{\langle v \rangle} = \frac{0,1 K \theta_D}{\langle v \rangle}$$

Здесь учтено, что $\hbar\omega_{\max} = K_B \theta_D$. Подставим числовые значения:

$$P = \frac{0,1 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 100}{1380} = 10^{-25} \frac{\text{Дж} \cdot \text{с}^{-1}}{\text{м}} = 10^{-25} \text{ Н} \cdot \text{с}$$

ОТВЕТ: $P = 10^{-25} \text{ Н} \cdot \text{с}$.

Задача 2. Вычислить теплоемкость единицы объема кристалла бромистого алюминия AlBr_3 по классической теории теплоемкости. Определить теплоту, необходимую для нагревания кристалла AlBr_3 массой 10 г на $\Delta T = 5$ К.

Решение.

Теплоемкость единицы объема кристалла можно определить по формуле:

$C = C_\mu / V_\mu$, где C_μ и V_μ теплоемкость и объем одного моля вещества. Молярная теплоемкость определяется по закону Неймана-Копфа: $C_\mu = 3nR$, где n -число атомов в соединении. Для AlBr_3 $n=4$. Объем V_μ можно выразить через плотность кристалла: $V_\mu = \mu / \rho$. Масса моля AlBr_3 равна: $\mu = 3\mu_{\text{Br}} + \mu_{\text{Al}}$. Подставим эти выражения в расчетную формулу для теплоемкости:

$$C = 12R\rho / (3\mu_{\text{Br}} + \mu_{\text{Al}}).$$

Из таблицы находим плотность этого кристалла $\rho = 3,01 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $\mu_{\text{Br}} = 80$ г/моль; $\mu_{\text{Al}} = 27$ г/моль. С учетом этих значений теплоемкость:

$$C = \frac{12 \cdot 8,31 \cdot 10^3 \cdot 3,01 \cdot 10^3}{3 \cdot 80 + 27} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \text{ К}} = 1,12 \cdot 10^6 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \text{ К}} = 1,12 \frac{\text{МДж}}{\text{м}^3 \text{ К}}$$

Теплота ΔQ , необходимая для нагревания тела от T_1 до T_2 , может быть вычислена по формуле:

$$\Delta Q = \int_{T_1}^{T_2} \frac{m}{\mu} C_\mu dt = \frac{m}{\mu} C_\mu \int_{T_1}^{T_2} dT = \frac{m}{\mu} C_\mu \Delta T$$

поскольку по классической теории молярная теплоемкость не зависит от температуры. Тогда окончательно:

$$\Delta Q = \frac{m}{\mu} 12 R \Delta T = (12 \cdot 10^{-2} \cdot 8,31 \cdot 10^3 \cdot 5 / 267) \text{ Дж} = 18,7 \text{ Дж}$$

ОТВЕТ: $\Delta Q = 18,7 \text{ Дж}$

Раздел 6. Магнитные свойства твердых тел.

Контрольная работа:

Задача 1. Найти численное значение уровня Ферми меди при абсолютном нуле, учитывая, что на каждый атом меди в кристалле имеется один электрон проводимости (свободный электрон) и что эффективная масса электронов m^* приблизительно равна массе свободных электронов (плотность меди $\rho = 8900 \text{ кг/м}^3$; молярная масса $\mu = 63,5 \text{ г/моль}$).

Решение. Найдем связь количества электронов проводимости с уровнем Ферми.

Число электронов проводимости в металле может быть найдено с учетом формулы:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left[\frac{(E - E_F)}{k_B T}\right] + 1}$$

где $dN(E) = g(E) f(E) dE$, функция распределения Ферми-Дирака. При $T=0$ $f(E)=1$, если $E < E_F$ и $f(E)=0$, если $E > E_F$.

Плотность разрешенных квантовых состояний электронов внутри энергетической зоны:

$$g(E) = 4 \pi V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2},$$

где V -объем кристалла; m - масса электрона; E -энергия электрона и h - постоянная Планка.

$$N = \int_0^{E_F(0)} dN = \int_0^{E_F(0)} g(E) f(E) dE = \int_0^{E_F(0)} 4 \pi V \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \cdot 1 \cdot dE = 8 \pi V \frac{(2m)^{3/2}}{3 h^3} [E_F(0)]^{3/2}.$$

Отсюда находим концентрацию электронов проводимости в металле:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{8 \pi (2m)^{3/2}}{3 h^3} [E_F(0)]^{3/2}. \quad E_F(0) = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3}.$$

Откуда энергия Ферми:

По условию задачи концентрация свободных электронов в меди равна концентрации

$$n = \frac{N_A}{V_\mu} = \frac{N_A \rho}{\mu},$$

атомов меди: где V_μ - объем моля меди, N_A - число Авогадро.

Подставляя в формулу значения N_A , ρ и μ , получаем:

$$n = \frac{6,02 \cdot 10^{26} \text{ моль}^{-1} \cdot 8900 \text{ кг} / \text{м}^3}{63,5 \text{ г} / \text{моль}} = 8,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$$

.Окончательно:

$$E_F(0) = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с})^2 \cdot (3 \cdot 8,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3})^{2/3}}{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 3,14^{2/3}} = 11,2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 7 \text{ эВ}.$$

ОТВЕТ: 7 эВ.

Задача 2 Какова вероятность того, что электрон в металле будет иметь энергию, равную энергии Ферми..

Решение При $E=\mu$ функция Ферми-Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_0 T}} + 1} = \frac{1}{1+1} = 0,5.$$

Вероятность нахождения электрона на уровне Ферми равна 0,5.

ОТВЕТ: 0,5.

Типовые вопросы к зачету по дисциплине «Физика конденсированного состояния»

Раздел 1. Введение в физику конденсированных сред

1. Строение конденсированных сред.
2. Кристаллическая структура и ее описание. Симметрия кристалла.
3. Дифракция в кристаллах. Межатомные силы и энергия связи.
4. Динамика кристаллической решетки.
5. Упругие волны, смещения атомов и фононы. Теплоемкость.
6. Ближний и дальний порядок, функция радиального распределения частиц, пространственная когерентность.
7. Методы ДСА и их применение к проблемам физики твердого тела.
8. Упорядочение атомно-кристаллической структуры. Теория дальнего порядка.

Раздел 2. Элементы кристаллографии.

1. Рентгено-электроно-нейтронография. Дифракционный структурный анализ.
2. Интенсивность спектра дифракционной решетки.
3. Интерференционная функция и ее отображение в обратном пространстве.
4. Уравнения Лауэ и формула Вульфа-Брэгга.
5. Лауэвские классы и рентгеновские пространственные группы.
6. Характеристика излучений, используемых в ДСА (рентген, нейтроны, электроны, синхротронное излучение).
7. Дифракционный анализ реальных кристаллов.
8. Методы анализа дифракционных картин от реального кристалла. Принципы динамической теории рассеяния.

Раздел 3. Зонная теория твердых тел.

1. Электронные волны в кристалле.
2. Энергия Ферми. Квазичастицы и электронная теплоемкость.
3. Электроны в металлах. Свойства электронного газа в основном состоянии.
4. Термодинамические свойства газа свободных электронов в приближении сферы Ферми.
5. Электроны в периодическом поле. Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна.
6. Энергетические зоны. Поверхность Ферми.
7. Квантовая теория гармонического кристалла.
8. Общая теория теплоемкости кристалла. Модели Дебая и Эйнштейна.
9. Фононы и фононный спектр. Теплоемкость при высоких, низких и промежуточных температурах.

Раздел 4. Электропроводность твердых тел

1. Идеальный и реальный кристаллы. Точечные дефекты и кластеры. Твердые растворы. Самодиффузия и диффузия.
2. Прочность и пластичность кристаллов. Континуальная теория дислокаций. Термодинамическое равновесие и фазовые превращения в твердом состоянии.
3. Термодинамические потенциалы и условия равновесия.
4. Классификация фазовых переходов.
5. Бездиффузионные и диффузионные фазовые превращения.

Раздел 5. Контактные явления

1. Основные методы ядерной физики для исследования конденсированных сред.
2. Ядерный магнитный резонанс (теория и методы).
3. Ядерный квадрупольный резонанс. Метод спинового эха. Методы ЭПР и ЯМР.
4. Мессбауэровская спектроскопия (теория и методы).
5. Мессбауэровское рассеяние и мессбауэровская дифракция.
6. Мессбауэровская конверсионная спектроскопия. Экспериментальные методы и их особенности.

Раздел 6. Магнитные свойства твердых тел.

1. Приближение почти свободных электронов. Современные методы расчета. Псевдопотенциал. Метод сильной связи. Плотность состояний.
2. Диаграммы состояний.
3. Энергия связи в приближении парного взаимодействия. Энтропия смешения.
4. Стабильность фаз и механизм фазовых превращений в твердом состоянии.
5. Конденсированные системы. Кристаллизация. Аморфизация. Жидкие кристаллы. Многообразие фазовых переходов.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения, характеризующих этапы формирования компетенций, описание шкал оценивания

Этап: проведение текущего контроля успеваемости по дисциплине

Текущий контроль предназначен для проверки качества формирования компетенций, уровня овладения теоретическими и практическими знаниями, умениями и навыками. Оценивание знаний теоретического материала по каждому разделу проводится на практических занятиях. Умение решать задачи проверяется контрольной работой.

Критерии оценивания контрольных работ

Проверяемые компетенции	Критерии оценивания	Оценка
ОК-6 ОК-7 ОПК-3	Все задачи решаются полностью: приводится верное аналитическое решение, делается правильный расчет.	Отлично
	Приведены решения задач контрольной работы, но есть небольшие недочеты при использовании законов, формул, в целом не влияющих на ход решения, допущены ошибки при вычислении численных результатов. Общая доля невыполненных заданий не превышает 5–7 % от	Хорошо

	общего объема контрольной работы.	
	Приведены решения не всех заданий контрольной работы, есть существенные недостатки при выводе аналитических выражений, не проведены численные расчеты. Общая доля невыполненных заданий составляет не более 50 % от общего объема контрольной работы.	Удовлетворительно
	Решения заданий приведены неверно или вовсе отсутствуют. Общая доля невыполненных заданий составляет более 50 % от общего объема контрольной работы.	Неудовлетворительно

Этап: проведение промежуточной аттестации по дисциплине

Для проведения промежуточной аттестации рабочим учебным планом предусмотрен зачет, к нему допускаются обучающиеся, успешно прошедшие все формы текущего контроля, предусмотренные рабочей программой дисциплины. Зачет оценивается по двухбалльной шкале: «зачет», «не зачет». Аттестационное испытание состоит из двух вопросов.

Критерии оценки ответа на поставленные вопросы.

Проверяемые компетенции	Критерии оценивания	Оценка
ОК-6 ОК-7 ОПК-3	– содержание ответа раскрывает тему задания; - материал изложен логически последовательно; - убедительно доказана практическая значимость.	<i>Зачет</i>
	Обнаружены существенные пробелы в знаниях основного программного материала по теме опроса.	<i>Не зачет</i>