

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Московский физико-технический институт
(государственный университет)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
Ю.А.Самарский
___ мая 2011 г.

ПРОГРАММА

по курсу: ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ
по направлению: 511600
факультет: ФНБИК
кафедра: физики и физического материаловедения
курс: 4
семестр: 7
лекции: 34 часа
практические (семинарские) занятия: 34 часа
лабораторные занятия: нет
самостоятельная работа: 2 часа в неделю
экзамен: 7 семестр
зачет: нет
ВСЕГО ЧАСОВ: 68

Программу и задание составил:
д.ф.-м.н., проф. Вакс Валентин Григорьевич

Программа утверждена на заседании кафедры физики и
физического материаловедения ___ мая 2011 года

Заведующий кафедрой

В.Г. Вакс

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

1. ФЛУКТУАЦИИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

1.1. *Термодинамическая теория флуктуаций*. Распределение Гаусса. Связь вероятности флуктуации с минимальной работой перевода в данное неравновесное состояние. Флуктуации основных термодинамических величин.

1.2. *Термодинамика неравновесных систем*. Релаксация слабо неравновесных систем, уравнения Онсагера. Связь времени релаксации с амплитудой равновесных флуктуаций.

1.3. *Феноменологическая теория фазовых переходов*. Фазовые переходы без изменения и с изменением симметрии. Теория фазовых переходов второго рода Л.Д. Ландау. Влияние внешнего поля на фазовый переход. Наноразмерные критические зародыши и барьер нуклеации для переходов первого рода.

Литература: [1]

2. СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

2.1. *Строение кристаллических решеток*. Координаты атомов в кристалле, решетки Браве, базис, элементарные и примитивные ячейки, ячейка Вигнера-Зейца. Типы симметрии (сингонии) кристаллов. Обратная решетка, геометрия кристаллических плоскостей, зоны Бриллюэна. Основные кристаллические структуры: типа NaCl, типа CsCl, ОЦК, ГЦК, ГПУ, типа алмаза, типа кубического и гексагонального ZnS, параметры упаковки. Геометрия плотно-упакованных решеток и упаковки твердых шаров. Квазикристаллы. Формулы разложений Фурье в конечном объеме, условия Борна-Кармана.

2.1. *Дифракция в кристаллах*. Методы определения структуры кристаллов. Брегговское отражение. Формула Ван-Хова, динамический и статический структурный фактор. Фактор Дебая-Уоллера.

Литература: [2], [4], [5]

3. КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ И ФОНОНЫ

3.1. Уравнения и частоты колебаний линейной одноатомной цепочки атомов, допустимые значения волнового вектора, длинноволновый предел. Квантование колебаний одноатомной цепочки атомов, гамильтониан, фононы, оператор смещения атома в цепочке.

3.2. Колебания кристаллической решетки в трехмерном случае: динамическая матрица, ее вид в одноатомном кристалле с парным межатомным взаимодействием, уравнения для спектра частот, длинноволновый предел. Акустические и оптические фононы. Квантовое выражение для оператора смещения атома в кристалле. Средний квадрат тепловых смещений атома. Вычисление фактора Дебая-Уоллера.

Литература: [2], [3], [4], [5]

4. ОСНОВНЫЕ ТИПЫ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

4.1. Электронные оболочки атомов в свободном состоянии и в твердом теле.

4.2. Взаимодействие между атомами или ионами с заполненными электронными оболочками. Ван дер Ваальсовское взаимодействие.

4.3. *Основные понятия теории валентности.* Связывающие и антисвязывающие орбитали. Метод Гайтлера-Лондона в теории молекулы водорода. Валентность различных элементов таблицы Менделеева. Ковалентные связи и тетраэдрические орбитали.

Литература: [2], [3]

5. ТИПЫ СВЯЗИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

5.1. Классификация и общая характеристика типов связи твердых тел: энергии связи, электронная структура, электрические и механические свойства.

5.2. *Ван дер Ваальсовская связь и криокристаллы.* Энергии связи, температуры плавления, кристаллическая и электрон-

ная структура. Кристаллы инертных газов: потенциалы взаимодействия, равновесный объем, модуль сжатия. Молекулярные кристаллы: распределение электронной плотности, ориентационные фазовые переходы. Роль квантовых эффектов в характеристиках структуры и динамики различных крио кристаллов.

5.3. *Ионная связь и ионные кристаллы.* Энергии связи, ионные радиусы, структуры, электронные свойства. Потенциалы взаимодействия, оценка их параметров из экспериментальных данных. Энергия Маделунга, её расчет методами Эвьена и Эвальда. Стабильность структур типа NaCl и CsCl.

5.4. *Металлическая связь.* Общая характеристика металлической связи. Модель "желе", кристаллические структуры, электрические и механические свойства. Энергия Маделунга в металлах; её оценка в модели сферической ячейки Вигнера-Зейца. Сравнение энергий Маделунга в структуре NaCl и в ГЦК Na при одном и том же расстоянии между атомами металла. Основные вклады в энергию связи простых металлов.

5.5. *Ковалентная связь.* Общая характеристика, энергии связи, электронные и механические свойства. Феноменология ковалентных связей в молекулах и твердых телах. Структуры и характеристики упаковки ковалентных кристаллов. Направленность и энергия ковалентных связей. Ковалентные стекла. Ионно-ковалентные соединения.

5.6. *Водородная связь.* Примеры систем с водородными связями, энергетика, типы и параметры водородных связей. Роль водородных связей в биологических системах. Двухминимумные водородные связи; фазовые переходы в кристаллах с такими связями. Остаточная энтропия льда.

5.7. Квазиодномерные и квазидвумерные системы со смешанной связью.

Литература: [2], [3], [4], [5], [6]

6. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Основные представления: валентные и остовные электроны, энергетические зоны, слабая и сильная связь. Основы теории зонной структуры, теорема Блоха, квазиимпульс. Уравнения для электронного спектра в базисе плоских волн. Зонная структура в случае слабой связи, энергетические щели и псевдощели в электронном спектре. Схемы приведенных, расширенных и повторяющихся зон. Метод сильной связи, ширина зоны и эффективная масса в случае малых интегралов перекрытия. Основные особенности электронной структуры в простых и переходных металлах, в полупроводниках и в диэлектриках.

Литература: [2], [3], [5], [6]

ЗАДАЧИ

1. ФЛУКТУАЦИИ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

1. Найти средние значения:

(а) флуктуаций $\langle \Delta p^2 \rangle$ и $\langle \Delta p \Delta V \rangle$;

(б) флуктуаций плотности $n = N/V$ в произвольной однокомпонентной системе и в частном случае Больцмановского идеального газа;

(в) квадрата скорости $\langle v_x^2 \rangle$ Броуновской частицы массы M в жидкости или газе.

2. В теории Гинзбурга-Ландау эффекты неоднородности параметра порядка η описываются добавлением к плотности свободной энергии $F(\eta)$ теории Ландау слагаемого $g(\nabla\eta)^2$. Используя эту теорию, найти распределение параметра порядка $\eta(x)$ вблизи плоской межфазной границы $x = 0$, если значения $\eta(x)$ при $x = \pm\infty$ равны $\pm\eta_0$, где значение η_0^2 соответствует однородной фазе. Найти поверхностную энергию единицы площади межфазной границы.

2. СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

3. Рассматривая кристалл, как систему соприкасающихся твердых шаров, найти параметр упаковки η , определяемый, как отношение объема, занятого шарами, к полному объему кристалла, для: (а) ГЦК структуры; (б) ОЦК структуры; и (в) структуры алмаза.

3. КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ И ФОНОНЫ

4. Найти спектр колебаний $\omega(k)$ линейной двухатомной цепочки, состоящей из чередующихся атомов масс m_1 и m_2 при взаимодействии только ближайших соседей. Показать, что при $m_1 \rightarrow m_2$ этот спектр переходит в спектр колебаний линейной цепочки одинаковых атомов.

4. ОСНОВНЫЕ ТИПЫ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

5. Найти энергию связи и волновую функцию электрона в одномерной модели молекулярного иона водорода H_2^+ , в которой взаимодействие электрона с протонами, находящимися в точках $x = a$ и $x = -a$, описывается δ -функциональными потенциалами:

$$U(x) = -V_0[\delta(x - a) + \delta(x + a)].$$

Исследовать случаи малых и больших расстояний a .

5. ТИПЫ СВЯЗИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

6. Выразить модуль сжатия $B = -Vdp/dV$ ГЦК кристалла, состоящего из атомов с потенциалом взаимодействия Ленарда Джонса, через энергию связи ϵ_c и равновесный атомный объем Ω_0 в этом кристалле.

7. В модели ионного кристалла с кулоновским и Борн-Майеровским взаимодействиями оценить (с точностью 20-30%) разность энергий связи в структурах NaCl и CsCl.

8. Найти постоянную Маделунга металла в модели сферической ячейки Вигнера-Зейца.

9. Для модели водородных связей Полинга найти остаточную энтропию льда, пренебрегая корреляцией в положениях

водорода вблизи ближайших атомов кислорода.

6. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

10. Найти энергию и волновую функцию электрона в слабом кристаллическом потенциале $U(\mathbf{r})$ для значений квазиимпульса \mathbf{k} , близких к границе зоны Бриллюэна $\mathbf{k} = \mathbf{k}_b$, соответствующей вектору обратной решетки \mathbf{g} и определяемой уравнением $\mathbf{k}_b^2 = (\mathbf{k}_b - \mathbf{g})^2$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1.] Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1 (Наука, 1995), §§ 20, 22, 110–113, 118 и 142–144.
[2.] Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела* (Мир, 1978), гл. 1–5, 9, 10, 20.
[3.] В.Г. Вакс, *Межатомные взаимодействия и связь в твердых телах* (ИздАТ, 2002), гл. 1-11.

Дополнительная литература

- [4.] М.И. Кацнельсон и А.В. Трефилов, *Динамика и термодинамика кристаллической решетки* (ИздАТ, 2002), гл. 2 и 4.
[5.] Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела* (Мир, 1974), гл. 1-4.
[6.] А. Анималу, *Квантовая теория твердых тел* (Мир, 1981), гл. 1-5.

Срок сдачи 1-го задания: 21.10.2011 года.

Срок сдачи 2-го задания: 23.12.2011 года.