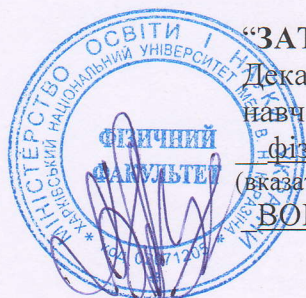


Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.ліфшиця



“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан факультету (директор
навчально-наукового інституту)
фізичний факультет

(вказати назву структурного підрозділу)

ВОВК Руслан Володимирович

(вказати П.І.Б керівника)

“30” 08 2023р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Спеціальний практикум «Квантова теорія конденсованого стану»

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти бакалавр

галузь знань 10 Природничі науки

(шифр і назва)

спеціальність 104 – Фізика та астрономія

(шифр і назва)

освітня програма “Фізика”

(шифр і назва)

спеціалізація _____

(шифр і назва)

вид дисципліни за вибором

(обов'язкова / за вибором)

факультет фізичний

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

“ 30 ” 08 2023 року, протокол № 6

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Рашба Георгій Ілліч, канд. фіз.-мат. наук, доц., в.о. завідувача кафедри теоретичної фізики імені академіка І.М. Ліфшиця;
Богдан Михайло Михайлович, доктор фіз.-мат. наук;
Єзерська Олена Володимирівна, канд. фіз.-мат. наук, доц.

Програму схвалено на засіданні кафедри
теоретичної фізики імені академіка. М. Ліфшиця

Програму схвалено на засіданні кафедри теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця

Протокол від “ 28 ” 08 2023 року № 9

Завідувач кафедри теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця


 (підпис)

Рашба Г.І.
 (прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньої програми

фізика (спеціальність 104 – фізика та астрономія)
 назва освітньої програми

Гарант освітньої (професійної/наукової) програми
 (керівник проектної групи) Лазоренко О.В.


 (підпис)

Лазоренко О.В
 (прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією
фізичного факультету

назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “ 29 ” 08 2023 року № 7

Голова методичної комісії фізичного факультету


 (підпис)

Макаровський М.О.
 (прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни спеціальний практикум «Квантова теорія конденсованого стану» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки першого рівню вищої освіти – бакалавр спеціальності (напряму) 104 – фізика та астрономія спеціалізації

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни – спеціального практикуму «Квантова теорія конденсованого стану» є:

формування уявлень студентів про квантові явища у кристалічних ґратках та особливості динаміки неідеальних кристалів з дефектами;

ознайомлення студентів зі сучасними методами квантової теорії поля у квантовій статистиці та подальші розрахунки термодинамічних величин конденсованих систем.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни спеціального практикуму «Квантова теорія конденсованого стану» є навчити студентів:

- основам квантової механіки кристалічної решітки;
- квазічастинковому підходу для опису в термінах фононів квантомеханічних властивостей і термодинаміки кристалів;
- розрахунку процесів непружного розсіювання нейтронів кристалами та відновлення законів дисперсії їхніх коливань;
- досліджувати процеси локалізації коливань у кристалах з дефектами і розраховувати частоти таких коливань;
- досліджувати одноелектронні енергетичні спектри в періодичних потенціалах точними і наближеними методами на основі зонної теорії;
- досліджувати властивості електронів провідності в постійних та високочастотних електромагнітних полях;
- користуючись навчальною та довідковою літературою, обирати адекватні методи розв'язку задач квантової механіки кристалів та теорії дефектів в кристалах;
- основним поняттям квантової механіки, необхідним для подальшого викладання цього курсу;
- володіти технікою вторинного квантування бозонів та ферміонів, вміти використовувати цей формалізм з метою опису електронів провідності у провідниках при наявності магнітного поля та без нього.

Компетентності, що забезпечуються дисципліною:

• Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується складністю та невизначеністю умов (ІК).

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК-2).
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-3).
- Здатність бути критичним і самокритичним (ЗК-4).
- Здатність приймати обґрунтовані рішення (ЗК-5).
- Навички міжособистісної взаємодії (ЗК-6).
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт (ЗК-8).
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків (ЗК-9).
- Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК-12).
- Здатність спілкуватися іноземною мовою (ЗК-13).
- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії (ФК-1).

- Здатність працювати із науковим обладнанням та вимірювальними приладами, обробляти та аналізувати результати досліджень (ФК-4).
- Здатність виконувати обчислювальні експерименти, використовувати чисельні методи для розв'язування фізичних та астрономічних задач і моделювання фізичних систем (ФК-5).
- Здатність моделювати фізичні системи та астрономічні явища і процеси (ФК-6).
- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту (ФК-7).
- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації (ФК-9).
- Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей (ФК-10).
- Усвідомлення професійних етичних аспектів фізичних та астрономічних досліджень (ФК-12).
- Орієнтація на найвищі наукові стандарти - обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики, астрономії та інших природничих наук. (ФК-13).
- Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту (ФК-14).

1.3. Кількість кредитів – 5.

1.4. Загальна кількість годин – 150.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
За вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
4-й	-й
Семестр	
8-й	-й
Лекції	
Не передбачені навчальним планом	год.
Практичні, семінарські заняття	
Не передбачені навчальним планом	год.
Лабораторні заняття	
50 год.	год.
Самостійна робота	
100 год.	год.
Індивідуальні завдання	
Не передбачені навчальним планом	
Залік	

1.6. Заплановані результати навчання

Згідно з вимогами освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми студенти повинні досягти таких результатів навчання:

знати: принципи і методи фізики твердого тіла, методи дослідження квантових моделей кристалів та основні підходи в теорії дефектів, методи сучасної квантової статистики.

вміти: застосовувати методи фізики твердого тіла для дослідження термодинамічних та кінетичних характеристик твердих тіл, досліджувати квантовомеханічні ефекти в кристалічних ґратках та спектри локальних мод у неідеальних

кристалах, застосовувати формалізм вторинного квантування та континуального інтегрування у процесі дослідження макроскопічних систем.

Програмні результати навчання, що забезпечуються дисципліною:

- Знати, розуміти та вміти застосовувати на базовому рівні основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії (ПРН-1).

- Знати і розуміти фізичні основи астрономічних явищ: аналізувати, тлумачити, пояснювати і класифікувати будову та еволюцію астрономічних об'єктів Всесвіту (планет, зір, планетних систем, галактик тощо), а також основні фізичні процеси, які відбуваються в них (ПРН-2).

- Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій (ПРН-3).

- Знати основні актуальні проблеми сучасної фізики та астрономії (ПРН-5).

- Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії (ПРН-6).

- Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних та астрономічних досліджень відповідно до спеціалізації (ПРН-7).

- Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань (ПРН-8).

- Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки (ПРН-11).

- Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень (ПРН-13).

- Знати і розуміти роль і місце фізики, астрономії та інших природничих наук у загальній системі знань про природу та суспільство, у розвитку техніки й технологій та у формуванні сучасного наукового світогляду (ПРН-17).

- Розуміти значення фізичних досліджень для забезпечення сталого розвитку суспільства (ПРН- 22).

- Розуміти історію та закономірності розвитку фізики та астрономії (ПРН-23).

- Розуміти місце фізики та астрономії у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій (ПРН-24).

- Мати навички самостійного прийняття рішень стосовно своїх освітньої траєкторії та професійного розвитку (ПРН-25).

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Цикл лабораторних робіт 1. Квантова механіка кристалла

Тема 1. Квантування малих коливань кристалла.

Тема 2. Представлення чисел заповнення.

Тема 3. Основний стан кристалла. Фонони.

- Тема 4. Квантові кристали.
- Тема 5. Ангармонізм коливань кристала і взаємодія фононів.
- Тема 6. Ефективний гамільтоніан взаємодії фононів і процеси розпаду.
- Тема 7. Квантово-механічне визначення функцій Гріна.
- Тема 8. Парний корелятор зсувів.
- Тема 9. Середній квадрат зміщення атома.
- Тема 10. Непружна дифракція на кристалі.
- Тема 11. Відновлення закону дисперсії коливань.
- Тема 12. Квазікласичне квантування самолокалізованих коливань в ангармонічному ланцюжку атомів.
- Тема 13. Зв'язаний стан фононів в ангармонічному ланцюжку атомів.

Цикл лабораторних робіт 2. Дефекти кристалічної решітки

- Тема 14. Моделі точкових дефектів кристалічної решітки.
- Тема 15. Локалізація коливань поблизу ізольованого ізотоп-дефекту.
- Тема 16. Функція Гріна для кристала з точковими дефектами.
- Тема 17. Локальні коливання при наявності двомірного (плоского) дефекту.
- Тема 18. Дислокації і дисклінації.

Цикл лабораторних робіт 3. Методи дослідження конденсованого стану

Тема 19. Методи розрахунку енергетичного спектру електрона, що рухається в періодичному полі: модель вільних електронів; модель майже вільних електронів (теорія слабого зв'язку); модель сильно зв'язаних електронів; модель Кроніга-Пенні (рішення методом трансфер-матриці); метод ортогоналізованих плоских хвиль та метод псевдопотенціалу;

Тема 20. Класична механіка частинки з довільним законом дисперсії. Рух в постійному електричному полі та в постійному магнітному полі зарядженої частинки з періодичним законом дисперсії.

Тема 21. Квазікласичне квантування рівнів енергії електрона з довільним законом дисперсії в магнітному полі.

Тема 22. Ефект де Гааза-ван-Альфена: кількісний та якісний розгляд для тривимірного металу простий розрахунок термодинамічних величин для двовимірного металу

Тема 23. Магнітний пробій.

Тема 24. Нормальний скін-ефект та аномальний скін-ефект.

Тема 25. Циклотронний резонанс.

Тема 26. Ефект Яна-Теллера.

Цикл лабораторних робіт 4. Методи квантової статистики

Тема 27. Формалізм Дірака у квантовій механіці.

Тема 28. Оператор еволюції.

Тема 29. Представлення Шредінгера, Гейзенберга і Дірака.

Тема 30. Матриця розсіяння.

Тема 31. Континуальні інтеграли.

Тема 32. Амплітуда переходу осцилятора.

Тема 33. Заряд у магнітному полі.

Тема 34. Квазікласичне наближення.

Тема 35. Функція Гріна для одночастинкового рівняння Шредінгера.

Тема 36. Хвильова функція бозонів у представленні вторинного квантування.

Тема 37. Квантово-механічні величини та оператори. Гільбертів простір хвильових

функцій.
Тема 38. Оператори знищення та породження бозонів.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви модулів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	лаб	Інд	с.р	
1	2	3	4	5	6	7
Цикл лабораторних робіт 1. Квантова механіка кристалла						
Тема 1	3			1		2
Тема 2	3			1		2
Тема 3	4.5			1.5		3
Тема 4	4.5			1.5		3
Тема 5	4.5			1.5		3
Тема 6	4.5			1.5		3
Тема 7	3			1		2
Тема 8	3			1		2
Тема 9	3			1		2
Тема 10	3			1		2
Тема 11	3			1		2
Тема 12	3			1		2
Тема 13	3			1		2
Разом за розділом 1	45			15		30
Цикл лабораторних робіт 2. Дефекти кристалічної решітки						
Тема 14	5			2		3
Тема 15	5			2		3
Тема 16	5			2		3
Тема 17	5			2		3
Тема 18	5			2		3
Разом за розділом 2	25			10		15
Цикл лабораторних робіт 3. Методи дослідження конденсованого стану						
Тема 19	3			1		2
Тема 20	3			1		2
Тема 21	3			1		2
Тема 22	3			1		2
Тема 23	3			1		2
Тема 24	3			1		2
Тема 25	3			2		4
Тема 26	4			2		4
Разом за розділом 3	30			10		20
Цикл лабораторних робіт 4. Методи квантової статистики						
Тема 27	3			1.5		2
Тема 28	3			1.5		2
Тема 29	3			1.5		2
Тема 30	3			1.5		2
Тема 31	3			1.5		2

Тема 32	3			1.5		2
Тема 33	3			1		2
Тема 34	3			1		2
Тема 35	4			1		2
Тема 36	4			1		2
Тема 37	4			1		2.5
Тема 38	4			1		2.5
Разом за розділом 4	40			15		25
Усього годин	150			50		100
Залік						

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

Див. тематичний план. Назви лабораторних робіт є назвами відповідних тем. Студенти під керівництвом викладача проводять аналітичні та чисельні розрахунки.

5. Самостійна робота

Пояснення щодо того, що повинен зробити студент під час самостійної роботи.

1. По всім нижче вказаним темам опрацювати результати, отримані під час аудиторних занять, прочитати відповідні параграфи в підручниках [1–22].
2. Самостійно підготуватися до участі лабораторних робіт.
3. Після викладу кожного розділу цієї навчальної дисципліни в рамках самостійної роботи студентам пропонуються домашні завдання. Вони покликані стимулювати більш глибоке вивчення та закріплення матеріалу навчальної дисципліни студентами.

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Квантова механіка кристалів.	2
2	Квантування коливань кристала.	2
3	Представлення чисел заповнення.	3
4	Фонони.	3
5	Оператори знищення і породження фононів.	3
6	Квантово-механічне визначення функції Гріна.	3
7	Процеси розсіювання фононів.	2
8	Взаємодія фононів.	2
9	Ефективний гамільтоніан взаємодії фононів.	2
10	Квантові кристали та рідини.	2
11	Квазікласичне квантування самолокалізованих коливань у ангармонічному ланцюжку атомів.	2
12	Зв'язаний стан фононів у ангармонічному ланцюжку атомів.	2
13.	Моделі точкових дефектів кристалічної решітки.	2
14	Локалізація коливань поблизу ізольованого ізотоп-дефекту.	3
15	Поле зміщень поблизу ізотоп-дефекту.	3
16	Функція Гріна для кристалу с точковими дефектами.	3
17	Локальні коливання при наявності двовимірного дефекту.	3
18	Дислокації і дисклінації.	3
19	Самостійно розглянути доказ теореми Блоха за допомогою оператора трансляції. Побудувати перші три зони в моделі	2

	Кроніга–Пенні за допомогою чисельного розв’язку трансцендентного дисперсійного рівняння.	
20	Розглянути рух в постійному електричному полі та в постійному магнітному полі зарядженої частинки з періодичним законом дисперсії $E(k)=t \cos(k)$.	2
21	Порівняти результати квазікласичного квантування рівнів енергії електрона з довільним законом дисперсії в магнітному полі з результатами точного квантування для електрона з квадратичним законом дисперсії	2
22	Самостійно провести розрахунок термодинамічних величин для двовимірного металу в ефекті де Гааза-ван-Альфена	2
23	Розглянути магнітний пробій в рамках моделі вільних електронів..	2
24	Нормальний скін-ефект та аномальний скін-ефект.	2
25	Якісний аналіз циклотронного резонансу	4
26	Ефект Яна-Теллера. Моделювання розщеплення рівнів енергії.	4
27	Розрахунок узагальненої нерівності Шварца.	2
28	Розрахунок узагальненої рівності Парсевалю.	2
29	Розрахунки власних значень та власних функцій оператора проектування.	2
30	Дослідження руху квантового осцилятора у представленні Гейзенберга.	2
31	Отримання хвильової функції електрона у магнітному полі в імпульсному представленні.	2
32	Розрахунок запізнювальної функції Гріна електрона та її часової фур’є-компоненти у магнітному полі.	2
33	Розрахунок функції Гріна електрона у схрещених електричному та магнітному полях.	2
34	Дослідження енергії основного стану неідеального бозе-газу.	2
35	Використання операторів густини маси, імпульсу, енергії, кутового моменту системи частинок.	2
36	Порівняльний аналіз компоненти Фур’є кулонівської взаємодії електронів у тривимірному, двовимірному та одновимірному випадках.	2
37	Розрахунок матричних елементів плоскої хвилі у базисі станів Ландау.	2.5
38	Дослідження гамільтоніану взаємодії електронів з коливаннями кристалічної ґратки, яка містить ізотопичні домішкові атоми з урахуванням магнітного квантування руху електронів.	2.5
	Разом	72

6. Індивідуальні завдання

Не передбачені навчальним планом.

7. Методи контролю

Поточне опитування, виконання та захист лабораторних робіт, залік.

8. Схема нарахування балів

Поточний контроль та самостійна робота				Письмовий залік	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Розділ 3	Розділ 4		
T1-T13	T14-T18	T19-T26	T27-T38	40	100
15	15	15	15		

Для зарахування заліку студент повинен здати чотири цикли лабораторних робіт, виконати домашні завдання і набрати не менше 7,5 балів за кожний з розділів. Для допуску до письмового заліку треба отримати за підсумками поточного контролю не менше 30 балів. За письмовий залік треба отримати не менше 20 балів та в підсумку не менше 50 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка за національною шкалою	
	для екзамену	для заліку
90 – 100	відмінно	зараховано
70-89	добре	
50-69	задовільно	
1-49	незадовільно	не зараховано

9. Рекомендована література Основна література

1. Косевич А.М. Механіка кристалічної ґратки Харків: "Акта", ISBN 966-7021-97-1, 305 с., 2006.
2. Kosevich A.M. The Crystal Lattice. Phonons, Solitons, Dislocations, Superlattices Wiley, New York, ISBN: 978-3-527-40508-4, 356 p., 2005.
3. Ziman J. Principles of the theory of solids. Cambridge University Press, 1972.
4. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons, Inc, 2004.
5. Kittel C. Quantum theory of solids. New York-London: John Wiley & Sons, Inc., 1991.
6. Landau L.D. Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory. Course of Theoretical Physics. V.3 / L.D.Landau, E.M.Lifshitz. Pergamon Press, 1991. – 674 p.
7. Abrikosov A. Fundamentals of the Theory of Metals / A. A. Abrikosov // Mineola, New York: Courier Dover Publications Inc.- 2017.- 640 P.
8. L.D.Landau, E.M.Lifshitz, Course of Theoretical Physics: Statistical Physics, Part.1 [Volume 5], Pergamon Press, 1969.
9. E.M.Lifshitz, L.P.Pitaevskii, Course of Theoretical Physics: Physical Kinetics [Volume 10], Pergamon Press, 1981.
10. Єрмолаєв О.М., Рашба Г.І. Вступ до статистичної фізики і термодинаміки. – Х. : ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2004. – 516 с.

Допоміжна література

1. Kadanoff L.P., Baum G. Quantum Statistical Mechanics. Green's Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems. – W.A.Benjamin, Inc., New York, 1962. – 203 p.

2. Abrikosov A. Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics / A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. Y. Dzyaloshinskii // Oxford: Pergamon Press.- 1965.- 388 P.
3. Negele J.W. and Orland H. Quantum Many-Particle Systems. – California: Addison-Wesley Publ. Co., 1988. – 456 p.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

Сайт кафедри теоретичної фізики:

http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students_study_ukr.html

http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students_ref_ukr.html

http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/presentations/chemical_bonds.pdf