

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна  
Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця\_

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

**Проректор  
з науково-педагогічної роботи**

**Пантелеймонов А. В.**

« \_\_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

**Теорія кристалічної решітки**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ бакалавр \_\_\_\_\_

галузь знань \_\_\_\_\_

(шифр і назва)

Спеціальність/напрямок підготовки \_\_\_\_\_ 6.040203 – фізика \_\_\_\_\_

(шифр і назва)

освітня програма \_\_\_\_\_

(шифр і назва)

спеціалізація \_\_\_\_\_

(шифр і назва)

вид дисципліни \_\_\_\_\_ обов'язкова \_\_\_\_\_

(обов'язкова / за вибором)

факультет \_\_\_\_\_ фізичний \_\_\_\_\_

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця\_

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

Проректор  
з науково-педагогічної роботи

Пантелеймонов А. В.

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Теорія кристалічної решітки

(назва навчальної дисципліни)

напрямок \_\_\_\_\_ 6.040203 – «Фізика» \_\_\_\_\_  
(шифр, назва напрямку)

спеціальність \_\_\_\_\_  
(шифр, назва спеціалізації)

спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр, назва спеціалізації)

факультет \_\_\_\_\_ фізичний \_\_\_\_\_

2018 / 2019 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою фізичного факультету

“ 21 ” червня 2018 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

**Богдан Михайло Михайлович, доктор фіз-мат. наук**

Програму схвалено на засіданні кафедри

теоретичної фізики імені академіка. М. Ліфшиця

Протокол від “15” серпня 2018 року протокол № 7

Завідувач кафедри теоретичної фізики академіка. М. Ліфшиця

( Рашба Г.І.)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією

фізичного факультету

назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “19” червня 2018 року № 6

Голова методичної комісії \_\_\_\_\_

Макаровський М.О.

(підпис)

(прізвище та ініціали)

## ВСТУП

### 1. Опис навчальної дисципліни

Програма навчальної дисципліни “**Теорія кристалічної решітки**” складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки першого рівню вищої освіти – бакалавр

напряму підготовки 6.040203 – фізика  
спеціальності

#### 1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни «Теорія кристалічної решітки» є формування уявлень студентів про квантові явища в кристалічних ґратках та особливості динаміки неідеальних кристалів з дефектами.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни «Теорія кристалів» є навчити студентів

- основам квантової механіки кристалічної решітки
- квазічастинковому підходу для опису в термінах фононів квантовомеханічних 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,
- користуючись навчальною та довідковою літературою, обирати адекватні методи розв’язку задач квантової механіки кристалів та теорії дефектів в кристалах.

1.3. Кількість кредитів 4

1.4. Загальна кількість годин 120

1.5. Характеристика навчальної дисципліни
За вибором
Денна форма навчання
Рік підготовки
4-й
Семестр
8-й
Лекції
39 год.
Семінарські заняття
13
Лабораторні заняття
Не передбачені навчальним планом
Самостійна робота
68 год. (з них 10 год. на виконання курсової роботи)
Індивідуальні завдання
Курсова робота. Під час самостійної роботи (10 год. з 68)

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

Знати, розуміти та бути здатним застосовувати на базовому рівні основні поняття та якісні, наближені та точні методи дослідження квантових моделей кристалів, методи квантування внутрішніх рухів атомів в кристалах, теоретичного дослідження

квазічастинкових збуджень в них, розраховувати розсіювання світла і нейтронів кристалами, термодинаміку кристалів, враховувати дефекти ґраток і їх вплив на динамічні властивості кристалів.

Бути здатним застосовувати базові математичні знання з теорії диференціальних рівнянь, математичної фізики та квантової механіки, вільно користуватись ними при розрахунках фізичних характеристик та квантовомеханічних ефектів в кристалічних ґратках та спектрах локальних мод у неідеальних кристалах.

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

### Розділ 1. Квантова механіка кристала

- Тема 1. Квантування малих коливань кристала.
- Тема 2. Представлення чисел заповнення.
- Тема 3. Основний стан кристала. 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 коррелятор 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.

### Розділ 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 двовірного (плоского) дефекту.
- Тема 18. Дислокації і дисклінації.

## 4. Структура навчальної дисципліни

Назви модулів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п (сем.)	лаб	Інд	сп	
1	2	3	4	5	6	7
<b>8 семестр</b>						
<b>Розділ 1. Квантова механіка кристала</b>						
Тема 1	6	2	1			3
Тема 2	6	2	1			3
Тема 3	6	2	1			3
Тема 4	6	2	1			3
Тема 5	6	2	1			3
Тема 6	6	2	1			3
Тема 7	7	2	1			4

Тема 8	6	2			4
Тема 9	6	2			4
Тема 10	6	2			4
Тема 11	6	2			4
Тема 12	6	2			4
Тема 13	7	2	1		4
Разом за розділом 1	80	26	8		46
<b>Розділ 2. Дефекти кристалічної решітки</b>					
Тема 14	8	3	1		4
Тема 15	8	3	1		4
Тема 16	7	2	1		4
Тема 17	7	2	1		5
Тема 18	8	3	1		5
Разом за розділом 2	40	13	5		22
<b>Усього годин</b>	<b>120</b>	<b>39</b>	<b>13</b>		<b>68</b>
<b>Екзамен</b>					

#### 4. Теми семінарських занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	3
1.	Квантування малих коливань кристала.	1
2.	Представлення чисел заповнення.	1
3.	Основний стан кристала. Фонони.	1
4.	Квантові кристали.	1
5.	Ангармонізм коливань кристала і взаємодія фононів.	1
6.	Ефективний гамільтоніан взаємодії фононів і процеси розпаду.	1
7.	Квантово-механічне визначення функцій Гріна.	1
8.	Зв'язаний стан фононів в ангармонічному ланцюжку атомів.	1
9.	Моделі точкових дефектів кристалічної решітки.	1
10.	Локалізація коливань поблизу ізольованого ізотоп-дефекту.	1
11.	Функція Гріна для кристала з точковими дефектами.	1
12.	Локальні коливання при наявності двомірного (плоского) дефекту.	1
13.	Дислокації і дисклінації.	1

#### 5. Завдання для самостійної роботи

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

1. По всім нижче вказаним темам опрацювати конспекти лекцій, прочитати відповідні параграфи в підручниках [1–8].
2. Самостійно підготуватися для участі у семінарських заняттях.
3. Написати курсову роботу та приготувати до неї презентацію.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Квантова механіка кристалів. Оператори народження та знищення	3

	в квантовій механіці.	
2	Квантування коливань кристала.	3
3	Представлення чисел заповнення.	3
4	Властивості фононного газу.	3
5	Оператори знищення і породження фононів.	3
6	Квантово-механічне визначення функції Гріна.	3
7	Процеси розсіювання фононів.	4
8	Взаємодія фононів.	4
9	Ефективний гамільтоніан взаємодії фононів.	4
10	Квантові кристали та рідини.	4
11	Квазікласичне квантування самолокалізованих коливань у ангармонічному ланцюжку атомів.	4
12	Зв'язаний стан фононів у ангармонічному ланцюжку атомів.	4
13.	Моделі точкових дефектів кристалічної решітки.	4
14	Локалізація коливань поблизу ізольованого ізотоп-дефекту.	4
15	Поле зміщень поблизу ізотоп-дефекту.	4
16	Функція Гріна для кристалу с точковими дефектами.	4
17	Локальні коливання при наявності двовимірного дефекту.	5
18	Дислокації і дисклінації.	5
	<b>Разом</b>	<b>68</b>

### 7. Індивідуальні завдання

Курсова робота, яка виконується під час самостійної роботи.

#### Запропоновані теми курсових робіт

1. Теплоємність сильно анізотропного квазіодновимірного кристала.
2. Теплопровідність кристалічної решітки при низьких температурах.
3. Квазікласичний спектр самолокалізованого коливання в моделі синус-Гордон.
4. Енергія основного стану неідеального газу фононів в наближенні Хартрі.
5. Середнє число фононів у ангармонічному ланцюжку атомів.
6. Локалізовані коливання одновимірного кристала з двома ізотоп-дефектами.
7. Поверхня кубічного кристалу як двовимірний плоский дефект.
8. Гармонічні коливання кристалу з дислокацією в моделі Френкеля-Конторової.

### 8. Методи навчання

Лекції, семінарські заняття, самостійна робота.

### 9. Методи контролю

Поточне опитування, участь у семінарських заняттях, контрольна робота, написання та захист курсової роботи, письмовий екзамен.

### 10. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання					Екзамен	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Контрольна робота, передбачена навчальним планом	Курсова робота	Разом		
T1-T13	T14-T18					
10	10	20	20	60	40	100

Для зарахування розділу 1 та розділу 2 треба набрати у підсумку не менше 5 балів за результатами поточного опитування та участі у семінарських заняттях за кожний з

розділів. Для зарахування контрольної роботи треба набрати у підсумку не менше 10 балів. Для здачі курсової роботи треба представити її в установлений термін у письмовому вигляді, підготувати презентацію та усно захистити роботу. Максимальна оцінка за курсову роботу – 20 балів. Для зарахування курсової роботи треба отримати не менше 10 балів. Для допуску до письмового екзамену треба набрати у підсумку не менше 30 балів.

#### Примітка.

1. Оцінка, яку отримує студент за кожну тему відповідає відсоткові правильного виконання поставленого завдання. Завдання вважається виконаним правильно, коли студент самостійно дав повну, вірну та вичерпну відповідь, не користуючись жодними зовнішніми джерелами інформації або підказками інших осіб, а також може (в разі необхідності) дати *прилюдне вірне, повне та вичерпне пояснення* щодо змісту цієї відповіді
2. У разі виявлення факту **академічної недоброчесності** із боку студента підчас перевірки курсової роботи оцінка за неї **повинна бути зменшена до 0** (пункт 7.12.5 «Положення про організацію освітнього процесу в ХНУ імені В. Н. Каразіна», наказ ректора № 0202-1/155 від 21.04.2017 р.).
3. До підсумкового семестрового контролю (екзамену) допускається студент денної форми навчання, який створив повний **рукописний** конспект лекцій, виконав і захистив курсову роботу та набрав не менш, ніж **30 балів**.
4. У разі виявлення факту **академічної недоброчесності** із боку студента підчас іспиту його екзаменаційна оцінка **повинна бути зменшена до 0**, а сам студент **має бути видалений з аудиторії**, до проводиться іспит (пункт 7.12.5 «Положення про організацію освітнього процесу в ХНУ імені В. Н. Каразіна», наказ ректора № 0202-1/155 від 21.04.2017 р.).

Екзаменаційний білет складається з двох теоретичних питань. Масимальна оцінка за кожне з питань 20 балів. Масимальна оцінка за екзамен – 40 балів.

#### **Критерії оцінювання письмової екзаменаційної роботи**

Екзаменаційний білет складається з трьох теоретичних питань. Кожне питання оцінюється в 20 балів. У відповіді на теоретичні питання студент повинен продемонструвати знання теорії навчальної дисципліни «Фізична кінетика» та її понятійно-категоріального апарату, термінології, понять і принципів предметної області дисципліни.

Максимальні бали виставляються в разі чіткої, логічної, послідовної відповіді на поставлене питання, з висновками основних формул, формулюванням фізичних законів

У процесі оцінювання теоретичних завдань екзаменаційного білету враховуються:

- повнота розкриття питання (4 бали);
- уміння чітко формулювати визначення фізичних понять, термінів та пояснювати їх (4 бали);
- здатність аргументувати отриману відповідь (4 бали);
- здатність робити аналітичні міркування, порівняння, формулювання висновків (4 бали);
- логічна послідовність викладення матеріалу у відповіді на завдання (4 бали).

Відповідь має бути обґрунтованою, з посиланням на відповідні фізичні закони та рівняння, з послідовними розрахунками всіх основних формул, доведеними до кінцевого результату з чіткою відповіддю на поставлене питання. За рішення задачі (практичного завдання) нараховуються такі бали:

1. Повна та послідовно обґрунтована відповідь отримує оцінку 20 балів у випадку, коли студент отримав правильну відповідь і продемонстрував метод і спосіб її отримання.



2. Оцінка 12-19 балів виставляється за відповідь, в якій є несуттєві похибки в логіці викладу,
3. Відповідь на питання отримує оцінку 7-11 балів, коли студент не отримав правильну відповідь або написав тільки кінцеву формулу без пояснень та виводу.
4. Відповідь на питання отримує оцінку 0-10 балів, коли студент не отримав правильну відповідь, причому метод і спосіб розв'язання завдання були не вірними.

**Екзамен зданий, якщо сумарна оцінка за письмову екзаменаційну роботу не менше 30 балів, а сумарний підсумковий бал не менше 50 балів.**

### Шкала оцінювання

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

## 9. Рекомендована література

### Основна література

1. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки (1988); Основы механики кристаллической решетки (1972).
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика т. III (1973).
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика ч. 1. т. V (1976).
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела.
5. Давыдов А.С. Теория твердого тела.
6. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.
7. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика ч. 2. т. IX (1978).
8. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел (1967).
9. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. В 2-х томах (1979).

### Допоміжна література

1. Косевич А.М. Введение в нелинейную физическую механику / А.М.Косевич, А.С. Ковалев – Киев: Наукова думка, 1989. – 300 с.
2. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела (1978).

## 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_study_ukr.html)

[http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/ukrainian/for%20students\\_ref\\_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](http://kaf-theor-phys.univer.kharkov.ua/presentations/chemical_bonds.pdf)

З освітніх матеріалів МФТІ:

<http://lectoriy.mipt.ru/course/viewall/>