

Кафедра квантовой механики.
Магистратура: 5 курс 9 семестр.
Программа лекций по спецкурсу СДМ.07
"Теория Твердого Тела. Часть II" (64 ч.).
(лектор проф. АБАРЕНКОВ Игорь Васильевич)

Глава I. Введение. Общие вопросы.

Многоэлектронная волновая функция, шредингеровская волновая функция, редуцированные матрицы плотности, функционал энергии, вариационный принцип для одного состояния и для группы состояний. Многодетерминантная волновая функция, конфигурация, одноконфигурационное приближение, многоконфигурационное приближение. Метод Хартри-Фока, многоконфигурационный метод самосогласованного поля.

Глава II. Электронная структура изоляторов.

Основное и возбужденные состояния кристалла. Волновая функция кристалла в представлении Блоха и представлении Ваннье. Экситонное представление. Экситон Френкеля. Давыдовское расщепление. Экситон Ваннье-Мотта. Оптические спектры.

Глава III. Теория электронного газа.

Электронный газ в металлах. Теория однородного электронного газа. Приближение Хартри-Фока. Эффекты электронной корреляции. Однородный электронный газ высокой и малой плотности. Вигнеровский электронный кристалл. Слабо неоднородный электронный газ. Диэлектрическая проницаемость. Градиентные поправки.

Глава IV. Теория функционала плотности.

Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шема. Обменно-корреляционный функционал. Техника Карр-Паринелло. Применение к расчету электронной структуры изоляторов и полупроводников. Теория хемосорбции.

Глава V. Метод Монте-Карло.

Классический метод Монте-Карло. Квантовый метод Монте-Карло. Применение к теории твердого тела.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Н Ашкрофт, Н Мермин, Физика твердого тела, Мир, Москва, 1979
2. Дж Займан, Принципы теории твердого тела, Мир, Москва, 1966
3. Дж Блейкмор, Физика твердого тела, Мир, Москва, 1988