

***Кафедра квантовой механики для кафедры физики твердого тела.***

***Магистратура: 5 курс 9 и 10 семестры.***

**Программа лекций по спецкурсу ДНМ.07**

**"Теория твердого тела" (80 ч.).**

**(лектор: к.ф.-м.н., доцент ТУПИЦЫН Илья Игоревич)**

***Глава I. Основы теории групп.***

1. Элементы симметрии. Преобразование систем координат.
2. Определение группы. Основные свойства группы.
3. Подгруппа. Изоморфизм и гомоморфизм групп.
4. Классы сопряженных элементов.
5. Представления групп. Эквивалентные представления.
6. Приводимые и неприводимые представления. Унитарные представления.
7. Характеры и их свойства.
8. Первая лемма Шура. Вторая лемма Шура (без доказательства).
9. Свойства ортогональности матричных элементов неприводимых представлений и их характеров.
10. Регулярное представление. Разложение приводимого представления на неприводимые.
11. Построение базисов неприводимых представлений. Операторы проектирования.
12. Прямое произведение групп. Прямое произведение представлений группы.

***Глава II. Применение теории групп в квантовой механике.***

1. Симметрия квантовомеханической системы.
2. Теорема Вигнера.
3. Правила отбора для матричных элементов операторов физических величин.

***Глава III. Симметрия кристаллов.***

1. Трансляционная и точечная симметрии.
2. Представления основных точечных групп.
3. Решетка Браве и кристаллические системы (сингонии).
4. Кристаллические классы. Винтовые оси и плоскости зеркального скольжения.
5. Решетка алмаза и цинковой обманки.
6. Пространственные группы. Элементы пространственных групп.

***Глава IV. Представления пространственных групп.***

1. Подгруппа трансляций. Представления подгруппы трансляций.
2. Обратная решетка. Ячейка Винера-Зейтца. Зона Бриллюэна.
3. Группа волнового вектора и построение ее неприводимых представлений.
4. Звезда вектора  $k$ . Неприводимые представления пространственной группы.

5. Нагруженные (проективные) представления.

**Глава V. Основы зонной теории.**

1. Адиаботическое приближение в теории твердого тела.
2. Одноэлектронное приближение в зонной теории.
3. Методы Хартри и Хартри-Фока. Построение кристаллического потенциала.
4. Метод Хартри-Фока в теории свободного электронного газа.
5. Метод Хартри-Фока-Слейтера и основные положения теории функционала плотности.
6. Метод псевдопотенциала в теории твердого тела. Псевдопотенциал Филлипса-Клейнмана. Сохраняющие норму псевдопотенциалы.
7. Теорема Блоха. Блоховские функции. Свойства симметрии одноэлектронных состояний. Неприводимая часть зоны Бриллюэна. Теорема обращения времени в зонной теории.
8. Общий характер энергетического спектра электрона в периодическом поле кристалла.
9. Приближение слабосвязанных электронов. Метод плоских волн. Метод ортогонализированных плоских волн.
10. Приближение сильносвязанных электронов. Суммы Блоха. Метод линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

**Глава VI. Метод (приближение) эффективной массы.**

1. Средняя скорость электрона в периодическом поле.
2. Тензор эффективных масс. Его приведение к диагональной форме.
3. Вычисление эффективных масс вблизи экстремума энергетической зоны (теория К-Р возмущений) для простой зоны.
4. Влияние внешних полей. Среднее ускорение.
5. Движение под влиянием внешних полей.
6. Функции Ванье. Свойства симметрии функций Ванье. Уравнения движения в представлении функций Ванье.

**Глава VII. Статистика электронов в кристалле.**

1. Заполнение одноэлектронных состояний. Статистика Ферми для электронов. Плотность одноэлектронных состояний.
2. Диэлектрики, металлы и полупроводники.
3. Поверхность Ферми. Электронная удельная теплоемкость.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. М.И. Петрашень, Е.Д. Трифонов. *Применение теории групп в квантовой механике*. Москва, Наука, 1967.
2. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. Москва, Наука, 1972.
3. А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников*. Москва, Наука, 1978.
4. Ч.Киттель. *Введение в физику твердого тела*. Москва, Наука, 1978.
5. Р.А. Эварестов, В.П. Смирнов. *Методы теории групп в квантовой химии твердого тела*. Ленинград, Издательство Ленинградского университета, 1987.
6. Дж. Каллуэй. *Теория энергетической зонной структуры*. Москва, Мир, 1969.
7. И.М. Цидильковский. *Электроны и дырки в полупроводниках*. Москва, Наука, 1972.
8. Дж. Зайнман. *Принципы теории твердого тела*. Москва, Мир, 1974.