

ИНСТИТУТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК И ЭКОЛОГИИ

ПРОГРАММА по курсу:

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ. I.

для студентов 4 курса (VIII семестр)

Автор: профессор Вакс Валентин Григорьевич

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.* Принцип Ле-Шателье. Термодинамические неравенства. Соотношение Эйнштейна между подвижностью и коэффициентом диффузии частицы в среде. 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. Теория фазовых переходов первого рода, близких к переходам второго рода: скачок параметра порядка, теплота перехода, температурная зависимость обобщенной восприимчивости и параметра порядка в области фазового перехода.

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. Формулы Фурье-разложений в конечном объеме, условия Борна-Кармана. Основные кристаллические структуры: типа NaCl, типа CsCl, ОЦК, ГЦК, ГПУ, типа алмаза, типа кубического и гексагонального ZnS, параметры упаковки. Квазикристаллы.

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

Литература: [2], [5], [6]

3. КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ И ФОНОНЫ

Уравнения колебаний кристаллической решетки. Динамическая матрица, ее вид в одноатомном кристалле с парным межатомным взаимодействием. Нормальные колебания, уравнения для спектра частот, длинноволновый предел. Спектр колебаний линейной двухатомной цепочки. Акустические и оптические фононы. Квантовое выражение для оператора смещения атома в кристалле. Средний квадрат тепловых смещений атома, его масштаб и температурная зависимость.

Литература: [2], [5], [6]

4. УПРУГИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Тензоры деформаций и напряжений. Энергия упругой деформации. Закон Гука в изотропной среде и в кристалле. Однородное растяжение изотропной среды, модуль Юнга и коэффициент Пуассона. Уравнения равновесия в изотропной среде и в кристалле. Упругие волны в изотропной среде.

Литература: [2], [3]

5. ОСНОВНЫЕ ТИПЫ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

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

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

5.3. *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], [4]

6. ТИПЫ СВЯЗИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

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

6.2. *Ван дер Ваальсовская связь и криокристаллы.* Энергии связи, температуры плавления, кристаллическая и электронная 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 криокристаллов.

6.3. *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.

6.4. *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.

6.5. *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.

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

6.7. Квазидномерные и квазидвумерные системы со смешанной связью.

Литература: [2], [4], [5], [6], [7]

7. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Основные представления: валентные и остовные электроны, особенности электронной структуры и электрических свойств в металлах, полупроводниках и диэлектриках. Элементы теории зонной структуры: теорема Блоха, квазиимпульс, энергетические зоны, слабая и сильная связь. Уравнения для электронного спектра в базисе плоских волн. Иллюстрация основных понятий зонной структуры на примере задачи об электронных состояниях в слабом кристаллическом потенциале. Схемы приведенных, расширенных и повторяющихся зон.

Литература: [2], [4], [6], [7]

ЗАДАНИЕ

График сдачи заданий: I задание - 01.04.05; II задание - 20.05.05.

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 v_x^2 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 $\omega_1(k)$ линейной одноатомной цепочки атомов со взаимодействием ближайших соседей. Показать, что спектр $\omega_2(k)$ аналогичной двухатомной цепочки с чередующимися атомами масс m_1 и m_2 при $m_1 \rightarrow m_2$ переходит в $\omega_1(k)$.

4. УПРУГИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

5. Выразить скорости продольного и поперечного звука в изотропной среде, c_l и c_t , через модуль сжатия B и модуль сдвига μ . Показать, что $c_t < c_l$.

5. ОСНОВНЫЕ ТИПЫ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

6. Рассматривая атомы А и В, как классические системы движущихся зарядов, имеющих частотно-зависящие электрические поляризуемости во внешнем поле $\chi_A(\omega)$ и $\chi_B(\omega)$, найти среднюю энергию взаимодействия таких атомов на больших расстояниях.

6. ТИПЫ СВЯЗИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

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

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

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

10. Для модели водородных связей Полинга найти остаточную энтропию льда, пренебрегая корреляцией в положениях водорода вблизи ближайших атомов кислорода.

7. ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

11. Найти энергетический спектр электронов для одномерного движения в потенциале

$$U(x) = U_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na).$$

Исследовать структуру зон в случаях малых и больших U_0 .

ЛИТЕРАТУРА

ОСНОВНАЯ:

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.
3. Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Теория упругости* (Наука, 1987), §§1-5, 7, 10, 22, 23.
4. В.Г. Вакс, *Межатомные взаимодействия и связь в твердых телах* (ИздАТ, 2002), гл. 1-11.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ:

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