

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Первый проректор-проректор
по научной работе

_____ А.В. Коржов

«_____» _____ 2022 г.

ПРОГРАММА

кандидатского экзамена по специальной дисциплине:

Научная специальность: 1.3.8. «Физика конденсированного состояния»

Разработчики:

1. *Воронцов Александр Геннадьевич, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой физики наноразмерных систем*
2. *Бескачко Валерий Петрович, д.ф.-м.н., доцент, профессор кафедры физики наноразмерных систем*
3. *Мирзоев Александр Аминулаевич, д.ф.-м.н., с.н.с., профессор кафедры физики наноразмерных систем*

Челябинск 2022 г.

РАЗДЕЛЫ ПРОГРАММ КАНДИДАТСКИХ ЭКЗАМЕНОВ

1. Перечень тем для подготовки к кандидатскому экзамену

1. Силы связи в твердых телах
2. Симметрия твердых тел
3. Дефекты в твердых телах
4. Дифракция в кристаллах
5. Колебания решетки
6. Тепловые свойства твердых тел
7. Электронные свойства твердых тел
8. Магнитные свойства твердых тел
9. Оптические и магнитооптические свойства твердых тел
10. Сверхпроводимость
11. Уравнение Шредингера для электрона в кулоновском потенциале.
12. Закономерности построения электронных оболочек атомов
13. Химическая связь в молекулах
14. Вариационное решение уравнения Шредингера.
15. Приближения для обменно-корреляционного функционала.
16. Псевдопотенциалы.

2. Вопросы для подготовки к сдаче кандидатского экзамена с учетом отрасли науки

1. Электронная структура атомов. Химическая связь и валентность. Типы сил связи в конденсированном состоянии: ван-дер-ваальсова связь, ионная связь, ковалентная связь, металлическая связь.
2. Химическая связь и ближний порядок. Структура вещества с ненаправленным взаимодействием. Примеры кристаллических структур, отвечающих плотным упаковкам шаров: простая кубическая, ОЦК, ГЦК, ГПУ, структура типа CsCl, типа NaCl, структура типа перовскита CaTiO_3 .
3. Основные свойства ковалентной связи. Структура веществ с ковалентными связями. Структура веществ типа селена. Гибридизация атомных орбиталей в молекулах и кристаллах. Структура типа алмаза и графита.
4. Кристаллические и аморфные твердые тела. Трансляционная инвариантность. Базис и кристаллическая структура. Элементарная ячейка. Ячейка Вигнера - Зейтца.
5. Решетка Браве. Обозначения узлов, направлений и плоскостей в кристалле.
6. Обратная решетка, ее свойства. Зона Бриллюэна.
7. Элементы симметрии кристаллов: повороты, отражения, инверсия, инверсионные повороты, трансляции. Операции (преобразования) симметрии.
8. Элементы теории групп, группы симметрии. Возможные порядки поворотных осей в кристалле. Пространственные и точечные группы (кристаллические классы). Классификация решеток Браве.
9. Точечные дефекты, их образование и диффузия. Вакансии и межузельные атомы. Дефекты Френкеля и Шоттки.
10. Линейные дефекты. Краевые и винтовые дислокации. Роль дислокаций в пластической деформации.
11. Распространение волн в кристаллах. Дифракция рентгеновских лучей, нейтронов и электронов в кристалле. Упругое и неупругое рассеяние, их особенности.
12. Брэгговские отражения. Атомный и структурный факторы. Дифракция в аморфных веществах.
13. Колебания кристаллической решетки. Уравнения движения атомов. Простая и сложная одномерные цепочки атомов. Закон дисперсии упругих волн. Акустические и оптические колебания.
14. Квантование колебаний. Фононы. Электрон-фононное взаимодействие.
15. Теплоемкость твердых тел. Решеточная теплоемкость. Электронная теплоемкость. Температурная зависимость решеточной и электронной теплоемкости.
16. Классическая теория теплоемкости. Закон равномерного распределения энергии по степеням свободы в классической физике. Границы справедливости классической теории.
17. Квантовая теория теплоемкости по Эйнштейну и Дебаю. Предельные случаи высоких и низких температур. Температура Дебая.

18. Тепловое расширение твердых тел. Его физическое происхождение. Анггармонические колебания.
19. Теплопроводность решеточная и электронная. Закон Видемана - Франца для электронной теплоемкости и теплопроводности.
20. Электронные свойства твердых тел: основные экспериментальные факты. Проводимость, эффект Холла, термоЭДС, фотопроводимость, оптическое поглощение. Трудности объяснения этих фактов на основе классической теории Друде.
21. Основные приближения зонной теории. Граничные условия Борна - Кармана. Теорема Блоха. Блоховские функции. Квазиимпульс. Зоны Бриллюэна. Энергетические зоны.
22. Брэгговское отражение электронов при движении по кристаллу. Полосатый спектр энергии.
23. Приближение сильносвязанных электронов. Связь ширины разрешенной зоны с перекрытием волновых функций атомов. Закон дисперсии. Тензор обратных эффективных масс.
24. Приближение почти свободных электронов. Брэгговские отражения электронов.
25. Заполнение энергетических зон электронами. Поверхность Ферми. Плотность состояний. Металлы, диэлектрики и полупроводники. Полуметаллы.
26. Намагниченность и восприимчивость. Диамагнетики, парамагнетики и ферромагнетики. Законы Кюри и Кюри - Вейсса. Парамагнетизм и диамагнетизм электронов проводимости.
27. Природа ферромагнетизма. Фазовый переход в ферромагнитное состояние. Роль обменного взаимодействия. Точка Кюри и восприимчивость ферромагнетика.
28. Ферромагнитные домены. Причины появления доменов. Доменные границы (Блоха, Нееля).
28. Антиферромагнетики. Магнитная структура. Точка Нееля. Восприимчивость антиферромагнетиков. Ферримагнетики. Магнитная структура ферримагнетиков. Спиновые волны, магноны.
29. Движение магнитного момента в постоянном и переменном магнитных полях. Электронный парамагнитный резонанс. Ядерный магнитный резонанс.
30. Комплексная диэлектрическая проницаемость и оптические постоянные. Коэффициенты поглощения и отражения. Соотношения Крамерса-Кронига.
31. Поглощения света в полупроводниках (межзонное, примесное поглощение, поглощение свободными носителями, решеткой). Определение основных характеристик полупроводника из оптических исследований.
32. Магнитооптические эффекты (эффекты Фарадея, Фохта и Керра). Проникновение высокочастотного поля в проводник. Нормальный и аномальный скин-эффекты. Толщина скин-слоя.
33. Сверхпроводимость. Критическая температура. Высокотемпературные сверхпроводники. Эффект Мейснера. Критическое поле и критический ток.
34. Сверхпроводники первого и второго рода. Их магнитные свойства. Вихри Абрикосова. Глубина проникновения магнитного поля в образец.
35. Эффект Джозефсона. Куперовское спаривание. Длина когерентности. Энергетическая щель.
36. Уравнение Шредингера для электрона в кулоновском потенциале. Электронная оболочка атома. Принцип Паули. Проблема решения многоэлектронного уравнения Шредингера. Квантовые числа. Орбиталь. Плотность вероятности нахождения электрона для разных орбиталей. Форма орбиталей.
37. Радиус Вигнера-Зейца. Эффективный радиус атома. Релятивистские поправки (Дарвиновский сдвиг). Эффект экранирования. Спин-орбитальное взаимодействие. Гибридизация. Лантанидное сжатие.
38. Вариационный метод Релея-Ритца. Базисный набор волновых функций. Волновые функции, имеющие симметрию молекулы (молекулярные орбитали). Волновые функции свободных атомов (приближение сильной связи). Порядок связи. Направленность связи.
39. Вариационное решение уравнения Шредингера, функционал полной энергии. Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение Хартри. Самосогласованное поле. Обобщение Фока и Слетера.
40. Теория функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона. Универсальный потенциал. Уравнение Эйлера. Теорема Кона-Шэма.

41. Приближения для обменно-корреляционного функционала. Ограничения метода функционала электронной плотности. Подходы к описанию дисперсионных взаимодействий. 42. Псевдопотенциалы. Псевдопотенциал Ашкрофта (приближение пустого ядра). 43. Представление волновой функции (базис ЛКАО, базис плоских волн). Ошибка суперпозиции базисного набора в случае ЛКАО. Программные реализации метода функционала электронной плотности. Выбор параметров моделирования.

3. **Перечень основной и дополнительной учебной литературы**

3.1. **Основная литература**

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
2. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. I, II. М.: Мир, 1979.
3. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. М.: Мир, 1969.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
5. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. М.: Высш. шк., 2000.
6. Вонсовский С.В. Магнетизм. М.: Наука, 1971.
7. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М.: Наука, 1979.
8. Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводимости. МЦ НМО, М., 2000.
9. Займан Дж. Основы квантовой теории твердого тела. - М.: Мир, 1970
10. Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел. - М.: Мир, 1983
11. Марч Н., Кон В., Вашишта П., Лундквист С. и др. Теория неоднородного электронного газа - М.: Мир, 1987.
12. Немошкаленко, В.В.; Антонов, В.Н. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов. – Киев: Наукова думка, 1985

3.2. **Дополнительная литература**

1. Блейкмор Дж. Физика твердого тела. М.: Мир, 1988.
2. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.; Наука, 1979.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.; Наука, 1976.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика сплошных сред. М.: Наука, 1976.
5. Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. М.: Мир, 1969.
6. Роуз-Инс А., Родерик Е. Введение в физику сверхпроводимости. М.: Мир, 1972.
7. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1982.
8. Richard M. Martin. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press, 2004
9. Veronika Brazdova, David R. Bowler. Atomistic Computer Simulations: A practical Guide. Wiley-VCH, 2013
10. Байдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. - М.: Мир, 2001

4. **Условия допуска к экзамену**

Претендент на сдачу кандидатского экзамена должен иметь диплом специалиста или магистра.

5. **Процедура проведения экзамена**

Лицо, сдающее экзамен, получает 5 вопросов из разных разделов программы. На подготовку отводится 2 часа. Вовремя подготовки можно использовать любую печатную литературу, запрещается пользоваться электронными устройствами.

При ответе на вопрос лицо, сдающее экзамен, кратко излагает подготовленный материал, отвечает на дополнительные вопросы.

Оценка от 1 до 5 ставится каждым членом комиссии по каждому вопросу отдельно. После всех ответов вычисляется среднее значение оценок, поставленных членами комиссии. Результатом сдачи экзамена является:

«неудовлетворительно» - результат меньше 2,7

«удовлетворительно» - результат от 2,7 до 3,6 (не включая)

«хорошо» - результат от 3,6 до 4,6 (не включая)

«отлично» - результат от 4,6 до 5.