МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Затверджено

на засіданні кафедри фізики металів
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 7 від 26 червня 2023 року)

Завідувач кафедри проф. Степан МУДРИЙ

Силабус
з навчальної дисципліни
«Квантова теорія твердого тіла»,
що викладається в межах ОНП «Теоретична фізика та астрофізика»,
ОНП «Експериментальна фізика»
другого (магістерського) рівня вищої освіти
для здобувачів з спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Львів 2023

Назва дисципліни	**Квантова теорія твердого тіла**
Адреса викладання дисципліни	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра фізики металів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань – 10 Природничі науки Спеціальність – 104 Фізика та астрономія
Викладачі дисципліни	Якібчук Петро Миколайович, д.ф.-м.н., професор, професор кафедри фізики металів
Контактна інформація викладачів	petro.yakibchuk@lnu.edu.ua https://physics.lnu.edu.ua/employee/yakibchuk
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та лабораторних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/kvantova-teoriya-tverdoho-tila-104-op-teoretychna-fizyka-ta-astrofizyka
Інформація про дисципліну	Дисципліна «Квантова теорія твердого тіла» є вибірковою дисципліною зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія» для другого (магістерського) рівня вищої освіти, яка викладається в 3 семестрі в обсязі **3** кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	Дисципліна «Квантова теорія твердого тіла» розроблена таким чином, щоб надати учасникам відповідні теоретичні знання, уміння, навички, загальні та фахові компетентності для продукування нових ідей, розв'язання проблем у галузі фізики твердого тіла. Тому у курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачене виконання лабораторних робіт, пов'язаних з застосуванням квантово-механічних і класичних методів моделювання зонної структури твердих тіл, вивчення їхніх електричних та магнітних властивостей.
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни "Квантова теорія твердого тіла» є навчити майбутніх спеціалістів володіти сучасними методами опису електронних властивостей твердих тіл, а саме ознайомити їх з основними квантово-механічними поняттями у фізиці твердого тіла. Навчити майбутніх спеціалістів самостійно проводити розрахунки енергетичного спектра та зонної структури твердих тіл із використанням низки квантово-механічних методів, серед яких є метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод комірок, метод функцій Гріна, метод плоских хвиль, метод ортогоналізованих плоских хвиль та інші. Ознайомити студентів із методиками першопринципних розрахунків електронних властивостей твердих тіл за допомогою побудови рядів теорії збурень за псевдопотенціалом електрон-іонної взаємодії. Навчити студентів самостійно використовувати вищезгадані методи для теоретичного прогнозування та інтерпретації експерименту.
Література для вивчення дисципліни	**Базова:** 1. Вакарчук І. О. Квантова механіка : підручник / І.О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с. 2. Пінкевич І. П., Сугаков В. І. Теорія твердого тіла. Навчальний посібник для студентів фізичних спеціальностей університетів. – К.: ВПЦ "Київський університет", 2006. – 334 с. 3. Theory of Solids (MIT open courses) https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-511-theory-of-solids-i-fall-2004/ https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-512-theory-of-solids-ii-spring-2009/

	4. Репецький С. П. Теорія твердого тіла. Електронні стани кристалів. Навчальний посібник. Київ, 2004.-102 с. 5. Якібчук П. М., Швець В. Т. Модельні методи в фізиці металів. Львів, ЛНУ. 2012. – 618 с. **Допоміжна:** 1. Репецький С. П. Теорія твердого тіла. Невпорядковані середовища : навч. посіб. – К.: Наукова думка, 2008. – 308 с. 2. Попель О. М. Фізика твердого тіла : текст лекцій / О.М. Попель. Львів : Львівський національний університет імені Івана Франка, 2020. – 104 с. 3. Збірник задач з фізики конденсованого стану : навчальний посібник. В 2 т. Т. 1 / А. В. Коротун, І. М. Тітов, Ю. А. Куницький, В. В. Погосов. – Запоріжжя : ЗНТУ, 2011. – 358 с. 4. Збірник задач з фізики конденсованого стану : навчальний посібник. В 2 т. Т.2 / А. В. Коротун, І. М. Тітов, Ю. А. Куницький, В. В. Погосов. – Запоріжжя : ЗНТУ, 2011. – 470 с. 5. Якібчук П. М. Фізика металів. Львів, видавничий центр ЛНУ ім. Івана Франка. 2000. – 103 с. 6. Поплавко Ю. М. Фізика твердого тіла : підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – Том 1: Структура, квазічастинки, метали, магнетики. – 415 с. 7. Поплавко Ю. М. Фізика твердого тіла : підручник. В 2-х томах. / Ю. М. Поплавко. – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, Вид-во «Політехніка», 2017. – Том 2: Діелектрики, напівпровідники, фазові переходи. – 379 с. 8. Lee J. D. Computational materials science: an introduction / J. G. Lee – Second edition. Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis, 2017. – 351 p. 9. Martin R. Electronic Structure. Basic theory and practical methods / R. Martin. – Cambrige – 2004. – 642 p. **Інформаційні ресурси:** 1. http://www.nbuv.gov.ua/ – Національна бібліотека України імені В.І. Вернадського. 2. http://www.lsl.lviv.ua/ - Львівська національна наукова Бібліотека України імені В. Стефаника 3. https://lnulibrary.lviv.ua/ – Наукова бібліотека Львівського національного університету імені Івана Франка
Тривалість курсу	Один семестр
Обсяг курсу	90 годин, з яких 32 годин аудиторних занять, з них 16 годин лекцій, 16 годин лабораторних занять та 58 години самостійної роботи
Очікувані результати навчання	В результаті вивчення цього курсу студент буде **знати:** традиційні методи розрахунку зонної структури твердих тіл, а саме метод лінійної комбінації атомних орбіталей, метод комірок, метод приєднаних плоских хвиль, метод плоских, ортогоналізованих та повністю ортогоналізованих плоских хвиль тощо.. **вміти:** оцінювати властивості електронного газу в основному стані, розраховувати його термодинамічні властивості; застосовувати метод ЛКАО до простих молекул і ідеальних кристалів; застосовувати метод псевдопотенціалу для опису електронної структури і властивостей твердих тіл; застосовувати відповідний метод розрахунку зонної структури у залежності від типу досліджуваного об’єкту; проводити розрахунки формфакторів псевдопотенціалів; проводити процедуру екранування локальних та нелокальних модельних потенціалів;

<table>
<tr><td></td><td>вибирати оптимальну модель та метод розрахунку параметрів першопринципних потенціалів та псевдопотенціалів.</td></tr>
<tr><td>Ключові слова</td><td>Тверде тіло, метод псевдопотенціалу</td></tr>
<tr><td>Формат курсу</td><td>Очний</td></tr>
<tr><td></td><td>Проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем</td></tr>
<tr><td>Теми</td><td>Наведено у табл.1</td></tr>
<tr><td>Підсумковий контроль, форма</td><td>Залік в кінці 3 семестру</td></tr>
<tr><td>Пререквізити</td><td>Для вивчення курсу студенти повинні знати основні закони та поняття з курсів загальної фізики, квантової механіки, фізики твердого тіла; вміти застосовувати набуті раніше знання з курсів математичного аналізу, диференційних рівнянь, методів математичної фізики, загальної фізики, квантової механіки, статистичної фізики, фізики твердого тіла та комп’ютерних технологій для розв’язку практичних завдань; володіти навиками пошуку та опрацювання спеціалізованої літератури, розв’язку алгебраїчних і диференційних рівнянь, побудови та аналізу графічних залежностей.</td></tr>
<tr><td>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</td><td>Використовуються такі методи навчання:
а) словесні – лекція, пояснення, бесіда, інструктаж (вступний та поточний) під час виконання лабораторних робіт;
б) наочні – ілюстрування лекційного матеріалу таблицями, схемами та графіками;
в) практичні – виконання лабораторних робіт, що передбачає організацію навчальної роботи для отримання нових знань, перевірки певних наукових гіпотез на рівні досліджень, узагальнень та аналізу та формування вмінь і навичок інтерпретації результатів досліджень різноманітних об’єктів.</td></tr>
<tr><td>Необхідне обладнання</td><td>Персональний комп’ютер, операційні системи (Windows, Linux), спеціальне програмне забезпечення (Abinit, Quantum ESPRESSO, LAMMPS), загальновживані комп'ютерні програми, проектор</td></tr>
<tr><td>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</td><td>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:
• лабораторні заняття: 90% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 90
90-70 — активна участь у 7–8 заняттях;
69-45 — активна участь у 6–5 заняттях;
44-20 — активна участь у 4–3 заняттях;
19-1 — активна участь у 1–2 заняттях;
0 — жодної активної участі в лабораторних заняттях;
• контрольна робота: 10% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 10.
Оцінювання письмової модульної контрольної роботи (0–10 балів) враховує рівень сформованості знань та вмінь на кінцевому етапі вивчення навчальної дисципліни. Відповідно 10 балів здобувач отримує за 100–96% правильних відповідей, 9 балів – 95–91% прав. відпов., 8 балів – 90–86% прав. відпов., 7 балів – 85–81% прав. відпов., 6 балів – 80–76% прав. відпов., 5 балів – 75–71% прав. відпов., 4 бали – 70–66% прав. відпов., 3 бали – 65–61% прав. відпов., 2 бали – 60–56% прав. відпов., 1 бал – 55–51% прав. відпов., 0 балів – 50% і менше правильних відповідей.
Шкала оцінювання модульної контрольної роботи
<table>
<tr><th>Кількість балів</th><th>% правильних відповідей</th></tr>
<tr><td>10</td><td>100-96</td></tr>
</table>
</td></tr>
</table>

9	95-91
8	90-86
7	85-81
6	80-76
5	75-71
4	70-66
3	65-61
2	60-56
1	55-51
0	50 і менше

Додаткові бали можна отримати за результатами неформального та/або інформального навчання по тематиці даного курсу. Визнання та зарахування результатів такого навчання відбувається у відповідності до наданих документів про неформальне та/або інформальне навчання. Також до 10 додаткових балів включно можна отримати через наукову роботу здобувача, куди входить написання тез, статтей, участь у міжнародних, всеукраїнських та/або інших заходах або конкурсах за тематикою навчальної дисципліни.

У разі відсутності студента під час проведення лабораторних занять чи контрольної роботи з поважних причин йому надається право на відпрацювання. У всіх інших випадках відсутність здобувача автоматично зараховується йому як незадовільна оцінка (0 балів) за відповідну тематичну лабораторну роботу чи контрольну роботу. Незадовільну оцінку студент має право перескласти. Додатковий термін перездачі призначає викладач.

Підсумковий контроль здійснюється на основі накопичених балів протягом семестру в процесі поточного контролю.

Підсумкова максимальна кількість балів 100.

Академічна доброчесність здобувачами вищої освіти передбачає самостійне виконання навчальних завдань, завдань поточного та підсумкового контролю результатів навчання. Списування, втручання в роботу інших студентів становлять, але не обмежують, приклади можливої академічної недоброчесності. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій чи усній роботі студента є підставою для її незарахування викладачем, незалежно від масштабів обману.

Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції і практичні заняття курсу. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття. У будь-якому випадку студенти зобов’язані дотримуватися усіх строків, визначених для виконання усіх видів робіт, передбачених курсом.

Література. Усю література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надано викладачами виключно в освітніх цілях без права її передавання третім особам. Студенти заохочуються до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.

Політика виставлення балів. Враховуються бали, набрані на практичних та поточному тестуванні. При цьому обов’язково враховуються присутність на заняттях та активність студента під час заняття; недопустимість пропусків та запізнень на заняття; користування мобільним телефоном, планшетом чи іншими мобільними пристроями під час заняття в цілях, не пов’язаних із навчанням; списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін.

	Жодні форми академічної недоброчесності не толеруються.
Питання на контрольні роботи	1. Обчислення псевдопотенціалів з перших принципів у квантовій теорії. 2. Властивості псевдопотенціалів. 3. Вирахування енергетичного спектру. 4. Теплопровідність та електропровідність металу в моделі Друде. 5. Закон Відемана-Франца в моделі Зомерфельда. 6. Властивості електронного газу в основному стані. 7. Квантова теорія Зоммерфельда. 8. Модельний потенціал Ашкрофта. 9. Розрахунок формфакторів нелокального МП. 10. Метод ортогоналізованих плоских хвиль. 11. Сфера Фермі. Енергія основного стану. 12. Факторизація формфакторів МП. 13. Метод псевдопотенціалу (квантово-механічний підхід). 14. Наближення майже вільних електронів. 15. Модельний потенціал Краско-Гурського. 16. Метод плоских хвиль. 17. Електрон в періодичному полі. Теорема Блоха. 18. МП Хейне-Абаренкова. 19. Модель Друде. 20. Модельний потенціал Шоу. 21. Властивості псевдопотенціала. 22. Термоелектричний ефект (квантова теорія) 23. Властивості електронного газу в основному стані. 24. Псевдопотенціал перехідних металів. 25. Статична електропровідність металу. 26. Наближення сильного зв'язку (квантова теорія). 27. Визначення параметрів МП. 28. Побудова та обчислення нелокального модельного потенціалу. 29. Модельний потенціал Хайне-Абаренкова. 30. Екранування нелокального модельного потенціалу. 31. Екранування локального МП. 32. Модельний потенціал точкового іона. 33. Метод модельного потенціалу в теорії металів 34. Факторизація формфакторів МП 35. Наближення: сфери Фермі, розсіювання вперед та назад. 36. Обчислення псевдопотенціалів з перших принципів. 37. Властивості псевдопотенціалів. 38. Вирахування енергетичного спектру. 39. Обчислення формфакторів екранованого МП. 40. Модельний потенціал Краско-Гурського. 41. Статична електропровідність металу. 42. Магнітні властивості твердих тіл.
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1

Схема курсу «**Квантова теорія твердого тіла**»

Тижні	Назва теми	Форма діяльності та обсяг годин	Термін виконання
1-2	Тема 1. Модель майже вільних електронів. **Література:** Б: 1-5; Д: 2, 5-9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 7 год.	2 тижні
3-4	Тема 2. Наближення сильного зв'язку.	Лекції – 2 год.,	2 тижні

	Література: Б: 1-5; Д: 2, 5-9.	лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 7 год.	
5-6	Тема 3. Метод плоских хвиль. **Література:** Б: 1-5; Д: 2, 5-9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 7 год.	2 тижні
7-7	Тема 4. Метод ортогоналізованих плоских хвиль. **Література:** Б: 1-5; Д:3-6,8,9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 7 год.	2 тижні
9-10	Тема 5. Метод повністю ортогоналізованих плоских хвиль. **Література:** Б: 1-5; Д:3-6,8,9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 7 год.	2 тижні
11-12	Тема 6. Модель модельних потенціалів у теорії металів **Література:** Б: 2-5; Д:3-6,8,9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 8 год.	2 тижні
13-14	Тема 7. Формалізм методу псевдопотенціалу. **Література:** Б: 2-5; Д:3-9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 2 год., самостійна робота – 8 год.	2 тижні
15-16	Тема 8. Розрахунок псевдопотенціалів з «перших принципів». **Література:** Б: 2-5; Д:3-9.	Лекції – 2 год., лаборат. заняття – 1 год., контрольна робота – 1 год. самостійна робота – 7 год.	2 тижні