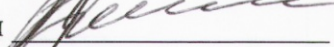


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Фізичний факультет
Кафедра експериментальної фізики

Затверджено

На засіданні кафедри експериментальної
фізики
фізичного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 10 від 27.01 2020р.)

Завідувач кафедри 
проф. Волошиновський А.С.

Силабус з навчальної дисципліни
«Енергетична структура та оптичні спектри кристалів»,
що викладається в межах третього (освітньо-наукового) рівня
вищої освіти для здобувачів
з спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Львів 2019 р.

**Силабус курсу «Енергетична структура та оптичні спектри кристалів»
2019–2020 н.р.**

Назва курсу	Енергетична структура та оптичні спектри кристалів
Адреса викладання курсу	вул. Кирила і Мефодія 8, 79005 Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Фізичний факультет, кафедра експериментальної фізики
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань: 10 Природничі науки Спеціальність: 104 Фізика та астрономія
Викладачі курсу	професор кафедри експериментальної фізики Вістовський В. В.
Контактна інформація викладачів	vistvv@gmail.com
Консультації по курсу відбуваються	Консультації в день проведення лекцій та практичних занять (за попередньою домовленістю). Також можливі он-лайн консультації через електронну пошту.
Сторінка курсу	https://physics.lnu.edu.ua/course/enerhetychna-struktura-ta-optyka-krystaliv
Інформація про курс	Курс розроблено таким чином, щоб надати учасникам відповідні загальні та фахові компетентності засновані на розумінні закономірностей електронної будови кристалів та методів її розрахунку. У курсі представлені відповідні теоретичні дані та передбачені практичні заняття із розрахунку електронних та оптичних спектрів кристалів.
Коротка анотація курсу	<p>Дисципліна «Енергетична структура та оптичні спектри кристалів» є нормативною дисципліною з спеціальності 104 – Фізика та астрономія для освітньої програми доктора філософії, яка пропонується як курс на вибір у 3 семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).</p> <p>Програма навчальної дисципліни складається з таких змістових модулів:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Поняття та закономірності зонної енергетичної структури кристалів; 2. Практичні методи розрахунку зонної енергетичної структури кристалів; 3. Розрахунок та експериментальне визначення оптичних функцій кристалів. <p>У першому модулі розглядаються теоретичні основи формування зонної енергетичної структури кристалів, використовувані наближення, зв'язок між енергетичною структурою атомів та кристалів.</p> <p>У другому модулі розглядаються підходи до розрахунку зонної енергетичної структури кристалів, вибору базисних функцій для формування хвильової функції електрона в кристалі, наближення для формування потенціалу кристалів.</p> <p>У третьому модулі зосереджено увагу розрахунок оптичних функцій кристала із попередньо розрахованої зонної енергетичної картини та метод їхнього експериментального визначення.</p>
Мета та цілі курсу	У курсі „ Енергетична структура та оптичні спектри кристалів ” з єдиних позицій розглядаються енергетична структура та оптичні властивості кристалів. Висвітлюються основні підходи до розрахунку

	<p>зонних енергетичних параметрів кристалів та засади прогнозування оптико-спектральних властивостей кристалів.</p> <p>Поряд з лекційним курсом аспіранти мають можливість проводити практичні розрахунки електронної будови кристалів та їх оптичних спектрів. Розрахунки проводяться із використанням пакету програм Abinit, який є одним із найбільш популярних та доступних інструментів для розрахунку електронного спектра, просторової структури та макроскопічних властивостей різноманітних систем із використанням теорії функціонала густини.</p> <p>Мета: ознайомлення з основними методами розрахунку та розшифрування зонної енергетичної структури кристалів, розрахунку та інтерпретації оптичних спектрів кристалів та основних оптичних функцій.</p> <p>Завдання: встановлення зв'язку між параметрами зонної енергетичної структури кристалів і їх спектральними властивостями, такими як спектри поглинання, діелектричні постійні, дисперсія показника заломлення;</p>
<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<p>Основна література:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Довгий Я.О., Кіпик І.В. Електронна будова і оптика нелінійних кристалів. Львів: „Світ”, 1996. –176 с. 2. І.М. Болеста. Фізика твердого тіла. Львів: ЛНУ, 2003, 479 с. 3. А.С. Марфунин. Введение в физику минералов. М: Недра, 1974, 328с. 4. В.В. Немошкаленко, В.Н. Антонов, Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Зонная теория металлов. Київ: Наукова думка, 1985, 408с. 5. П.С. Киреев. Физика полупроводников. М: Высш школа, 1975, 584с. 6. У. Харрисон. Теория твердого тела. М: Мир, 1972, 616с. 7. І.М. Цидильковский. Электроны и дырки в полупроводниках. Энергетический спектр и динамика. М: Наука, 1972, 640с. 8. А.М. Сатанин. Введение в теорию функционала плотности. Нижн. Новг. 2009. 9. А.Н. Васильев, В.В. Михайлин. Введение в спектроскопию диэлектриков. М: МГУ, 2008, 218с. 10. www.abinit.org
<p>Тривалість курсу</p>	<p>один семестр</p>
<p>Обсяг курсу</p>	<p>90 годин, з яких 48 години аудиторних занять, з них 32 годин лекцій, 16 годин практичних занять, та 42 години самостійної роботи</p>
<p>Очікувані результати навчання</p>	<p>Після завершення цього курсу аспірант буде :</p> <p>знати: основні наближення, що використовуються для розрахунку електронної будови кристалів; основні методи теоретичних розрахунків зонних структур кристалів; методи розрахунку основних оптичних функцій кристалів; принципи ідентифікації особливостей оптичних спектрів; експериментальні оптико-спектральні методи визначення параметрів енергетичної структури кристалів;</p> <p>вміти: розрахувати електронну енергетичну структуру атомів, молекул, кристалів, нанооб'єктів із використанням пакету програм</p>

	Abinit; здійснювати розрахунок загальної та парціальної густини електронних станів кристалів; візуалізувати просторову густину електронів у кристалах; розраховувати та проводити інтерпретацію спектрів поглинання кристалів проводити розрахунок головних оптичних функцій кристалів. здійснювати оптимізацію кристалічної ґратки
Ключові слова	спадковість, мінливість, генеалогічний аналіз, близьнюковий метод, геном, хромосоми
Формат курсу	Очний /заочний
	проведення лекцій, лабораторних робіт та консультації для кращого розуміння тем
Теми	Наведено у табл.1
Підсумковий контроль, форма	іспит в кінці семестру усний
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань з дисциплін генетика, біологія індивідуального розвитку тварин, фізіологія людини достатніх для сприйняття категоріального апарату.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	Презентація, лекції, дискусія, розв'язок задач, підготовка доповідей.
Необхідне обладнання	персональний комп'ютер, загальнонавчівані комп'ютерні програми і операційні системи, проектор
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням: <ul style="list-style-type: none"> • практичні/самостійні тощо: 20% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 20 • контрольні заміри (модулі): 30% семестрової оцінки; максимальна кількість балів 30 • іспит: 50% семестрової оцінки. Максимальна кількість балів 50 Підсумкова максимальна кількість балів 100
Питання до екзамену	<ol style="list-style-type: none"> 1. Рівняння Шредінгера для кристала 2. Адіабатичне наближення 3. Одноелектронне наближення 4. Рівняння Хартрі та Хартрі-Фока 5. Періодичне поле кристала. Оператор трансляції 6. Теорема Блоха. Функція Блоха 7. Зони Брилюена 8. Поняття оберненої ґратки. Обернені ґратки кубічної симетрії 9. Дискретність квазіімпульсу 10. Теорія слабозв'язаних електронів 11. Теорія сильнозв'язаних електронів 12. Класифікація методів розрахунку зонної структури 13. Методи комірок 14. Варіаційні методи 15. Симетрія кристалів і класифікація електронних станів 16. Метод приєднаних плоских хвиль 17. Метод функцій Гріна 18. Метод ортогоналізованих плоских хвиль

	19. Метод псевдопотенціалу 20. Теорія функціоналу густини 21. Розрахунок оптичних спектрів кристалів 22. Експериментальне визначення оптичних функцій
Опитування	

Таблиця 1

Схема курсу «Енергетична структура та оптичні спектри кристалів»

Тиждень	Тема занять (перелік питань)	Форма діяльності та обсяг годин	Додаткова література / ресурс для виконання завдань (за потреби)	Термін виконання
1	Вступ. Рівняння Шредінгера для кристала	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
2	Адіабатичне наближення. Одноелектронне наближення. Рівняння Хартрі та Хартрі-Фока.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
3	Періодичне поле кристала. Оператор трансляції. Теорема Блоха. Функція Блоха.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
4,5	Зони Бріллюена. Поняття оберненої ґратки. Обернені решітки кубічної симетрії. Дискретність квазіімпульсу	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год		2 тижні
6	Теорія слабозв'язаних електронів.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
7	Теорія сильнозв'язаних електронів	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
8	Класифікація методів розрахунку зонної структури.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
9, 10	Теоретико-груповий аналіз електронних станів кристалів	Лекції – 4 год, практ. заняття – 2 год, самостійна робота – 4 год		2 тижні
11	Метод приєднаних плоских хвиль. Метод функцій	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень

	Гріна.			
12	Метод ортогоналізованих плоских хвиль. Метод псевдопотенціалу.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
13	Теорія функціоналу густини	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
14	Густина електронних станів. Сингулярності Ван-Хова.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
15	Розрахунок оптичних спектрів кристалів.	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень
16	Експериментальне визначення оптичних функцій	Лекції – 2 год, практ. заняття – 1 год, самостійна робота – 2 год		1 тиждень