



Nazwa przedmiotu Badanie struktury elektronowej ciał stałych - wybrane metody teoretyczne		Kod ECTS 3.4-WM (3.4-BSE)		
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki / Instytut Fizyki / Katedra Zastosowań Fizyki Jądrowej				
Studia				
kierunek Fizyka		stopień III	tryb stacjonarne	specjalność Fizyka
				specjalizacja nazwa*
*nazwa zgodna z zatwierdzonym katalogiem kierunków i specjalności				
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących) Edward Boroński				
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS: 3		
A. Formy zajęć (wybrać) <ul style="list-style-type: none">wykład		<u>Godziny kontaktowe:</u> Udział w wykładach – 30 godzin Udział w konwersatoriach – 15 godzin		
B. Sposób realizacji (wybrać) <ul style="list-style-type: none">zajęcia w sali dydaktycznej		<u>Praca własna studenta:</u> Analiza i przyswojenie treści poznanych na wykładach: 10 godz. Przygotowanie do konwersatorium: 8 godz. Przygotowanie do egzaminu: 12 godz.		
C. Liczba godzin 45 godzin wykład				
Status przedmiotu <ul style="list-style-type: none">do wyboru		Język wykładowy polski		
Metody dydaktyczne <ul style="list-style-type: none">wykład z prezentacją multimedialną		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne <ul style="list-style-type: none">Sposób zaliczeniaEgzamin		
		B. Formy zaliczenia na przykład: <ul style="list-style-type: none">Wykład – egzamin.		
		C. Podstawowe kryteria Wykład – znajomość materiału przedstawionego na wykładzie.		
Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi Należy określić: A. Wymagania formalne. Analiza matematyczna, Algebra liniowa, Fizyka ogólna. B. Wymagania wstępne. Znajomość podstawowych praw fizyki klasycznej, kwantowej, oraz zagadnień fizyki fazy skondensowanej.				
Cele przedmiotu Zapoznanie doktorantów z metodami stosowanymi w rozwiązywaniu niektórych problemów dotyczących struktury elektronowej ciał stałych. Znajduje tu zastosowanie wiedza nabyta w różnych dziedzinach fizyki.				

Treści programowe

Struktura krystaliczna, symetria w ciałach stałych. Zarys teorii grup i reprezentacji. Dynamika sieci krystalicznej w przybliżeniu harmonicznym i anharmonicznym. Przybliżenie adiabatyczne. Gaz elektronów swobodnych, statystyka Fermiego-Diraca. Wieloelektronowa funkcja falowa, reprezentacja liczb obsadzeń. Oddziaływanie między elektronami. Kwantowa teoria ekranowania. Stany elektronowe w sieci krystalicznej. Obraz wiązań międzyatomowych w ciele stałym. Teoria pasmowa – jakich informacji o materiałach można oczekiwać na podstawie takiego modelu. Podstawowe metody wyznaczania struktury pasmowej w zależności od wyboru bazy funkcji jednoelektronowych. Przybliżenie pola samouzgodnionego. Podejście DFT, potencjały wymiennie-korelacyjne. Przybliżenia LDA, GGA i WDA. Uwzględnienie oddziaływania spin-orbita. Metale, półmetale, półprzewodniki i izolatory w ramach teorii pasmowej- obraz możliwości wyznaczania różnych parametrów struktury elektronowej i modelowania nowych materiałów. Zalety i wady podejść jednoelektronowych. Dynamika elektronów. Stany elektronowe w polu magnetycznym. Wyznaczanie powierzchni Fermiego na bazie obliczeń teoretycznych i badań doświadczalnych. Stany elektronowe w układach jedno- i dwuwymiarowych.

Wykaz literatury

Literatura wykorzystywana podczas wykładu:

1. W. Harrison, *Teoria ciała stałego*, PWN Warszawa 1976.
2. N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Fizyka ciała stałego*, PWN Warszawa 1986.
3. J.M. Ziman, *Wstęp do teorii ciała stałego*, PWN Warszawa 1977.
4. L. Piela, *Idee chemii kwantowej*, PWN 2003.
5. *Wybrane artykuły z czasopism naukowych.*

Efekty kształcenia (Szczegółowe zalecenia i wskazówki praktyczne przedstawiono w „Jak przygotować programy kształcenia...” Krasniewski A., rozdz. 5.3.2.2. str.46-49.

Wiedza

K_W01, K_W03 Posiada wiedzę o strukturze materiałów krystalicznych oraz o znaczeniu i zastosowaniach krystalografii w fizyce ciała stałego. Zna podstawowe modele dotyczące dynamiki sieci krystalicznej.

K_W03 Ma pogłębioną wiedzę dotyczącą oddziaływań elektronów w ciałach stałych.

K_W03 Zna różne podejścia i przybliżenia związane z opisem stanów elektronowych w ciałach stałych.

K_W04 Ma pogłębioną wiedzę na temat wybranych metod obliczania struktury pasmowej ciał stałych. Zna odpowiednie techniki obliczeniowe.

K_W04, K_W05 Zna podstawowe metody teoretyczne i doświadczalne badania powierzchni Fermiego.

Umiejętności

K_U03 Potrafi posługiwać się metodami fizyki teoretycznej, w szczególności wykorzystać formalizm mechaniki kwantowej do opisu niektórych zjawisk w ciałach stałych a także metod ich badania.

K_U03 Potrafi wykorzystać wiedzę z dziedziny krystalografii w prostych obliczeniach struktury pasmowej.

K_U02 Potrafi korzystać z wybranego pakietu do obliczeń struktury pasmowej, interpretować podstawowe wyniki i porównywać je z wynikami prac oryginalnych.

Kompetencje społeczne (postawy)

K_K02 Potrafi dyskutować o problemach naukowych w danej dziedzinie i współdziałać z innymi osobami (naukowcami) przy opracowywaniu projektów badawczych.

K_K02 Ma świadomość konieczności upowszechniania wyników badań naukowych, które prowadzi do konfrontacji z wynikami innych naukowców.

K_K05 Ma świadomość, że rzetelne prowadzone badania naukowe przyczyniają się do rozwoju nauki.

Kontakt

Adres email lub telefon do osoby odpowiedzialnej za przedmiot: e.boronski@uni.opole.pl