

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE  
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu: Własności elektronowe materii skondensowanej

Rok akademicki: 2016/2017 Kod: JFI-3-302-s Punkty ECTS: 3

Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kierunek: Fizyka Specjalność: —

Poziom studiów: Studia III stopnia Forma i tryb studiów: Stacjonarne

Język wykładowy: Polski Profil kształcenia: Ogólnoakademicki (A) Semestr: 3

Strona www: —

Osoba odpowiedzialna: prof. dr hab. inż. Tobiła Janusz (tobola@fis.agh.edu.pl)

Osoby prowadzące: prof. dr hab. inż. Tobiła Janusz (tobola@fis.agh.edu.pl)  
dr hab. inż. Wiendlocha Bartłomiej (wiendlocha@fis.agh.edu.pl)

### Krótką charakterystyka modułu

Student posiada wiedzę o metodach obliczeń struktury elektronowej i własności fizycznych układów materii skondensowanej. Student potrafi zainstalować dedykowane programy oraz przeprowadzić obliczenia.

### Opis efektów kształcenia dla modułu zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Powiązania z EKK	Sposób weryfikacji efektów kształcenia (forma zaliczeń)
Wiedza			
M_W001	Student posiada podstawową wiedzę o możliwościach opisu teoretycznego oraz metodach obliczeń struktury elektronowej i własności fizycznych układów materii skondensowanej.	FI3A_W01	Prezentacja
M_W002	Student posiada wiedzę o możliwościach obliczeń wybranych właściwości elektronowych materiałów magnetycznych, nadprzewodzących, termoelektrycznych oraz na ogniwa jonowe.	FI3A_W01	Prezentacja
Umiejętności			

M_U001	Student potrafi przeprowadzić krytyczną analizę wyników obliczeń, zinterpretować uzyskane wielkości fizyczne, podać ich związek z charakterystyką elektronową badanych materiałów i porównać z danymi eksperymentalnymi.	FI3A_U01	Sprawozdanie
M_U002	Student potrafi zainstalować dedykowane programy oraz przeprowadzić przy ich użyciu obliczenia związane z tematyką przedmiotu.	FI3A_U01	Sprawozdanie
Kompetencje społeczne			
M_K001	Student potrafi poprawnie wyjaśniać - przy użyciu właściwej terminologii - zagadnienia będące przedmiotem zajęć laboratorium komputerowego.	FI3A_K01, FI3A_K02, FI3A_K03	Udział w dyskusji

## Matryca efektów kształcenia w odniesieniu do form zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Forma zajęć										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Inne	E-learning
Wiedza												
M_W001	Student posiada podstawową wiedzę o możliwościach opisu teoretycznego oraz metodach obliczeń struktury elektronowej i własności fizycznych układów materii skondensowanej.	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W002	Student posiada wiedzę o możliwościach obliczeń wybranych właściwości elektronowych materiałów magnetycznych, nadprzewodzących, termoelektrycznych oraz na ogniwa jonowe.	+	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Umiejętności												
M_U001	Student potrafi przeprowadzić krytyczną analizę wyników obliczeń, zinterpretować uzyskane wielkości fizyczne, podać ich związek z charakterystyką elektronową badanych materiałów i porównać z danymi eksperymentalnymi.	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
M_U002	Student potrafi zainstalować dedykowane programy oraz przeprowadzić przy ich użyciu obliczenia związane z tematyką przedmiotu.	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-

Kompetencje społeczne												
M_K001	Student potrafi poprawnie wyjaśniać - przy użyciu właściwej terminologii - zagadnienia będące przedmiotem zajęć laboratorium komputerowego.	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-

## Treść modułu zajęć (program wykładów i pozostałych zajęć)

### Wykład

Elementarny opis kryształów i układów topologicznie nieuprządkowanych (2 h)

Podział substancji fizycznych ze względu na kryterium symetrii. Układy ciał stałych o wysokiej symetrii: kryształy i ich deformacje. Nietypowe stany materii – ciecze kwantowe. Model sztywnych kul Bernala, wielościany Voronoi. Relacja Eulera-Poincare. Problem przestrzennego upakowania i liczby koordynacyjnej. Hipoteza Keplera. Funkcje dystrybucyjne.

Podstawy teorii stanów elektronowych kryształów (2 h).

Zagadnienie rozpraszania elektronów. Przypomnienie wyników dla modelu elektronów “prawie” swobodnych. Metoda pseudopotencjału i koncepcja obliczeń samouzgodnionych. Energia gazu elektronowego (oddziaływanie wymiennokorelacyjne). Funkcja dielektryczna. Pasma energetyczne i powstawanie przerwy.

Wprowadzenie do obliczeń struktur elektronowych w ramach DFT (2 h).

Równania Hartree-Focka. Równania Kohna-Shama. Twierdzenia Hohenberga-Kohna. Teoria funkcjonału gęstości elektronowych i spinowych. Przybliżenie lokalnej gęstości elektronowej LDA, GGA i wyjście poza te przybliżenia. Metody obliczeń struktury elektronowej układów ciał stałych (realnych, niżej wymiarowych).

Podstawy teoretyczne rozpraszania elektronów w stopach (2 h)

Nieporządek chemiczny. Funkcja Greena a gęstość stanów. Przypadek cząstki swobodnej oraz ogólnego potencjału krystalicznego. Przybliżenia VCA (virtual crystal approximation) oraz CPA (coherent potential approximation). Opisy nieporządku w ramach modelu TB (tight binding).

Nieporządek a przejścia metal-izolator (2 h)

Defekty punktowe (domieszki i wakansje) w półprzewodnikach, ich wpływ na własności transportowe oraz optyczne. Zagadnienie lokalizacji elektronów (przejście Motta oraz Andersona). Półprzewodzące układy nieuprządkowane.

Opis zjawisk transportu elektronów w materii skondensowanej (2 h)

“Czworobok” termoelektryczny i współczynniki Onsagera. Formuły Zimana i Motta na przewodność elektryczną oraz siłę termoelektryczną dla metali. Równanie transportu Boltzmanna i przybliżenie czasu relaksacji. Wpływ sieci (fononów) na przewodność elektryczną termosilę. Przewodność cieplna i kłopoty z prawem Wiedemanna-Franza. Własności optyczne i relacje Kramersa-Kroniga. Formuły Drudego.

Struktura elektronowa materiałów na ogniwa jonowe (2 h).

Charakterystyczne cechy struktury elektronowej wybranych grup tlenków metali przejściowych. Własności magnetyczne i transportowe układów na ogniwa jonowe. Wpływ defektów krystalicznych na charakter elektromotorycznej krzywej ładowania/rozładowania ogniwa jonowych. Problem przewodnictwa elektronowego i

jonowego.

### **Ćwiczenia laboratoryjne**

#### Wprowadzenie do laboratorium obliczeniowego

Laboratorium składające się z kilku ćwiczeń polegać będzie na samodzielnym rozwiązaniu na komputerze zagadnień z zakresu wykładu. Każde spotkanie poprzedzone będzie ustną prezentacją rozważanego problemu przez studentów. Podstawowym narzędziem obliczeń będą programy dedykowane, które należy zainstalować i uruchomić na serwerze obliczeniowym. Studenci wykonywać będą przede wszystkim obliczenia struktury elektronowej i wielkości fizycznych dla wybranych materiałów.

Alternatywnie (dla studentów zainteresowanych taką formą zaliczenia laboratorium), istnieje możliwość napisania własnego oprogramowania do wybranego zagadnienia będącego przedmiotem wykładu. Podczas kolejnych spotkań taka grupa studentów będzie prezentować postępy w realizacji projektu.

#### Struktura ciał stałych (od kryształu do amorfika)

Spodziewane efekty zajęć:

- student potrafi skonstruować komórkę elementarną dla podstawowych sieci krysztalicznych w przestrzeni prostej (Wignera-Seitza) i odwrotnej (strefy Brillouina) dla struktur z bazą jednoatomową i wieloatomową,
- student potrafi zapisać różne konfiguracje atomowe w komórce przy pojawianiu się nieporządku obsadzeń,
- student potrafi dokonać podziału płaszczyzny i przestrzeni metodą teselacji Voronoi oraz dualnej teselacji Delaunay dla przypadkowo wygenerowanych pozycji atomów (modelowanie amorfika).

#### Struktura elektronowa materiałów (od metalu do półprzewodnika, od ferromagnetyka do paramagnetyka i niemagnetyka)

Struktura elektronowa materiałów (od metalu do półprzewodnika, od ferromagnetyka do paramagnetyka i niemagnetyka) [6 h]

Spodziewane efekty kształcenia:

- student potrafi obliczyć strukturę elektronową przykładowego metalu i półprzewodnika dla komórki z bazą jednoatomową (np. Si, Cu, Bi) i wieloatomową (np. GaN, NiAs),
- student potrafi zanalizować wyniki obliczeń struktury elektronowej z polaryzacją spinową dla układów magnetycznych prostych (Fe, Ni) i złożonych (NiMnSb, CoMnGe, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, ...)
- student potrafi zobrazować wyniki obliczeń w postaci funkcji gęstości stanów oraz pasm elektronowych dla materiałów na ogniwa jonowe.

#### Obliczenia właściwości magnetycznych, termoelektrycznych i nadprzewodzących układów nieuporządkowanych.

Spodziewane efekty kształcenia:

- student potrafi rozpoznać topologiczne cechy powierzchni Fermiego i ich związek z policzonymi pasmami elektronowymi dla wybranych układów niemagnetycznych i magnetycznych (np. zagadnienie znikania powierzchni Fermiego wskutek podstawień),
- student potrafi obliczyć podstawowe parametry struktury elektronowej odpowiedzialne za nadprzewodnictwo (w ramach modelu BCS) dla znanych nadprzewodników (np. Nb-Mo),
- student potrafi obliczyć czasy życia i prędkości elektronów oraz oszacować ich wpływ na przewodność elektryczną i termosiłę w wybranych domieszkowanych półprzewodnikach.

### **Sposób obliczania oceny końcowej**

Podstawa oceny przedmiotu będzie średnia ocen zaliczenia laboratorium obliczeniowego (50%) oraz półgodzinnej prezentacji wyników własnych obliczeń struktury elektronowej i własności fizycznych wybranego materiału (50%).

### **Wymagania wstępne i dodatkowe**

Nie podano wymagań wstępnych lub dodatkowych.

### **Zalecana literatura i pomoce naukowe**

- 1 Cusack N E, The Physics of Structurally Disordered Matter, IOP Publishing Ltd. (1987).
- 2 Blatt, F J, Fizyka Zjawisk Elektronowych w Metalach i Półprzewodnikach, PWN, Warszawa (1973).
- 3 Ziman J M, Models of disorder, Cambridge University Press (1979).
- 4 Zallen R., Fizyka Ciał Amorficznych, Wydawnictwa Naukowe PWN, Warszawa (1994).
- 5 Martin, R M, Electronic structure. Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press (2004).
- 6 Grimvall G, The Electron-Phonon Interaction in Metals, North-Holland (1981).
- 7 Grimvall G, Thermophysical Properties of Materials, North-Holland (1999).
- 8 McKinnon A, Lecture Notes; <http://www.cmth.ph.ic.ac.uk/angus/Lectures/>
- 9 Materiały dydaktyczne na stronie <http://newton.ftj.agh.edu.pl/~tobola> (zostaną udostępnione po rozpoczęciu wykładu).

### **Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu**

Nie podano dodatkowych publikacji

### **Informacje dodatkowe**

Brak

### **Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)**

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Udział w wykładach	14 godz
Udział w ćwiczeniach laboratoryjnych	14 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	14 godz
Przygotowanie sprawozdania, pracy pisemnej, prezentacji, itp.	7 godz
Wykonanie projektu	7 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	56 godz
Punkty ECTS za moduł	3 ECTS