

Программа спецкурса «Периодические модели квантовой химии – Часть I»

(весна 2011 г.)

Теоретические разделы:

I. Простейшие атомистические модели твердого тела.

1. Продольные и поперечные нормальные колебания бесконечной одноатомной цепочки. Волновое число, дисперсия частоты, первая зона Бриллюэна.
2. Плотность колебательных состояний бесконечной одноатомной цепочки как функция волнового числа и как функция частоты. Особые точки.
3. Продольные нормальные колебания линейной двухатомной цепочки. Акустическая и оптическая ветви, первая зона Бриллюэна.

II. Трансляционная симметрия и ее применения.

1. Трансляционная симметрия. Оператор трансляции и его собственные функции. Теорема Блоха.
2. Групповые свойства трансляций. Группа трансляций бесконечной одноатомной цепочки, ее неприводимые представления, связь с волновым числом.
3. Нормальные колебания бесконечной одноатомной цепочки с периодическими граничными условиями. Дискретный спектр частот, семплирование зоны Бриллюэна, формы колебаний.
4. Циклическая симметрия задачи о колебаниях цепочки с периодическим граничным условием. Неприводимые представления циклической группы. Построение симметризованных смещений атомов с использованием аппарата теории групп.
5. Двумерные и трехмерные решетки Браве. Базис кристаллической решетки, примеры кристаллов с различным базисом. Трансляционная симметрия двумерных и трехмерных кристаллов.
6. Биортогональные базисы и их свойства. Базис обратной решетки и примеры его построения для простейших двух- и трехмерных решеток (прямоугольная примитивная, квадратная, двумерная гексагональная, орторомбическая примитивная, кубическая примитивная). Характеристики трехмерной трансляционной группы.

III. Расчет колебаний кристаллических решеток.

1. Теория колебаний решеток из «первых принципов». Общая формулировка задачи для модели идеального бесконечного кристалла. Гармоническое приближение, матрица силовых постоянных, ее трансляционная симметрия.
2. Учет периодических граничных условий Борна-Кармана. Циклическая симметрия, симметризованные смещения и смысл их введения. Динамическая матрица. Расчет дисперсионных зависимостей частот.
3. Модельный расчет и качественное обсуждения закона дисперсии колебаний трехмерного кристалла на примере простой кубической решетки.

Задачи

1. Вывести закон дисперсии колебаний конечной одно- и двухатомной цепочки при различных типах граничных условий (условия Дирихле, периодические условия).
2. Построить симметризованные смещения атомов в бесконечной N -атомной цепочке (N – произвольное число), определить количество ветвей закона дисперсии.
3. Построить базис обратной решетки для случая, когда исходная решетка:
 - плоская ромбическая,
 - трехмерная гексагональная.
4. Вывести закона дисперсии колебаний для:
 - простой квадратной решетки,
 - простой кубической решеткив гармоническом приближении с учетом только ближайших соседних связей.

Составил к.ф.-м.н. Щербинин А.В.