

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра фізичної оптики



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Декан фізичного факультету

Руслан БОВК

« 1 » Вересня 2023 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

### Спектроскопія твердого тіла

|                     |                                   |
|---------------------|-----------------------------------|
| Рівень вищої освіти | <b>перший (бакалаврський)</b>     |
| Галузь знань        | <b>10 – природничі науки</b>      |
| Спеціальність       | <b>104 – фізика та астрономія</b> |
| Освітня програма    | <b>фізика</b>                     |
| Спеціалізація       |                                   |
| Вид дисципліни      | <b>за вибором</b>                 |
| Факультет           | <b>фізичний</b>                   |

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою фізичного факультету.

Протокол від 30.08.2023 р. № 6.

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Маковецький Євген Дмитрович, канд. фіз.-мат. наук, доцент каф. фізичної оптики

Програму схвалено на засіданні кафедри фізичної оптики.

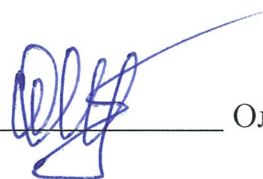
Протокол від 28.08.2023 р. № 1.

В. о. завідувача кафедри фізичної оптики



Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми «Фізика».

Гарант освітньо-професійної програми

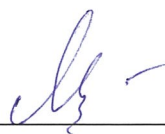


Олег ЛАЗОРЕНКО

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету.

Протокол від 29.08.2023 р. № 7.

Голова методичної комісії



Микола МАКАРОВСЬКИЙ

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Спектроскопія твердого тіла» складена відповідно до освітньої програми підготовки «бакалавр» зі спеціальності «104 – фізика та астрономія», освітньо-професійна програма «Фізика».

### 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни – оволодіти основоположними уявленнями про експериментальні дослідження оптичних властивостей твердих тіл та про теорію цих властивостей.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни – вивчити матеріал щодо оптичних властивостей твердих тіл в рамках робочої програми даного курсу та додаткового матеріалу, який рекомендовано вивчити самостійно.

Компетентності, що забезпечуються дисципліною:

- Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується складністю та невизначеністю умов (ІК 1).
- Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях (ЗК 2).
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК 3).
- Здатність приймати обґрунтовані рішення (ЗК 5).
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт (ЗК 8).
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків (ЗК 9).
- Здатність спілкуватися державною мовою як усно, так і письмово (ЗК 12).
- Здатність спілкуватися іноземною мовою (ЗК 13).
- Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії (ФК 1).
- Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту (ФК 7).
- Здатність працювати з джерелами навчальної та наукової інформації (ФК 9).
- Здатність самостійно навчатися і опановувати нові знання з фізики, астрономії та суміжних галузей (ФК 10).
- Усвідомлення професійних етичних аспектів фізичних та астрономічних досліджень (ФК 12).
- Орієнтація на найвищі наукові стандарти – обізнаність щодо фундаментальних відкриттів та теорій, які суттєво вплинули на розвиток фізики, астрономії та інших природничих наук (ФК 13).
- Здатність здобувати додаткові компетентності через вибіркові складові освітньої програми, самоосвіту, неформальну та інформальну освіту (ФК 14).

1.3. Кількість кредитів – 5.

1.4. Загальна кількість годин – 150.

|   |                                     |
|---|-------------------------------------|
| 1.5. Характеристика навчальної дисципліни |                                     |
| Нормативна / за вибором                   |                                     |
| Денна форма навчання                      | Заочна (дистанційна) форма навчання |
| Рік підготовки                            |                                     |
| 4-й                                       |                                     |
| Семестр                                   |                                     |
| 8-й                                       |                                     |
| Лекції                                    |                                     |
| 32 год.                                   |                                     |
| Практичні, семінарські заняття            |                                     |
| 18 год.                                   |                                     |
| Лабораторні заняття                       |                                     |
| не передбачено навчальним планом          |                                     |
| Самостійна робота                         |                                     |
| 100 год.                                  |                                     |
| в тому числі індивідуальні завдання       |                                     |
| курсова робота: 20 год.                   |                                     |

#### 1.6. Заплановані результати навчання

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основні теоретичні положення для опису оптичних властивостей металів, діелектриків, напівпровідників; головні відомі експериментальні результати досліджень оптичних властивостей твердих тіл.

вміти: застосовувати здобуті знання для одержання, аналізу та пояснення експериментальних даних при дослідженнях електронних і коливальних оптичних спектрів.

Програмні результати навчання, що забезпечуються дисципліною:

- Знати, розуміти та вміти застосовувати на базовому рівні основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії (ПРН 1).
- Знати і розуміти фізичні основи астрономічних явищ: аналізувати, тлумачити, пояснювати і класифікувати будову та еволюцію астрономічних об'єктів Всесвіту (планет, зір, планетних систем, галактик тощо), а також основні фізичні процеси, які відбуваються в них (ПРН 2).
- Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій (ПРН 3).
- Знати основні актуальні проблеми сучасної фізики та астрономії (ПРН 5).
- Оцінювати вплив новітніх відкриттів на розвиток сучасної фізики та астрономії (ПРН 6).
- Розуміти, аналізувати і пояснювати нові наукові результати, одержані у ході проведення фізичних та астрономічних досліджень відповідно до спеціалізації (ПРН 7).

- Мати базові навички самостійного навчання: вміти відшукувати потрібну інформацію в друкованих та електронних джерелах, аналізувати, систематизувати, розуміти, тлумачити та використовувати її для вирішення наукових і прикладних завдань (ПРН 8).
- Вміти упорядковувати, тлумачити та узагальнювати одержані наукові та практичні результати, робити висновки (ПРН 11).
- Розуміти зв'язок фізики та/або астрономії з іншими природничими та інженерними науками, бути обізнаним з окремими (відповідно до спеціалізації) основними поняттями прикладної фізики, матеріалознавства, інженерії, хімії, біології тощо, а також з окремими об'єктами (технологічними процесами) та природними явищами, що є предметом дослідження інших наук і, водночас, можуть бути предметами фізичних або астрономічних досліджень (ПРН 13).
- Знати і розуміти роль і місце фізики, астрономії та інших природничих наук у загальній системі знань про природу та суспільство, у розвитку техніки й технологій та у формуванні сучасного наукового світогляду (ПРН 17).
- Розуміти значення фізичних досліджень для забезпечення сталого розвитку суспільства (ПРН 22).
- Розуміти історію та закономірності розвитку фізики та астрономії (ПРН 23).
- Розуміти місце фізики та астрономії у загальній системі знань про природу і суспільство та у розвитку суспільства, техніки і технологій (ПРН 24).
- Мати навички самостійного прийняття рішень стосовно своїх освітньої траєкторії та професійного розвитку (ПРН 25).

## **2. Тематичний план навчальної дисципліни**

### *Розділ 1. Структура та сили зв'язку у твердих тілах*

- Тема 1.* Вступ. Історія розвитку спектроскопії твердого тіла. Види поглинання у твердих тілах.
- Тема 2.* Класифікація твердих тіл по силам міжатомного зв'язку.

### *Розділ 2. Оптичні властивості та спектри металів*

- Тема 1.* Оптичні спектри металів та теорія Друде. Твердотільна плазма у металах. Поверхневі плазмові хвилі.

### *Розділ 3. Коливальні спектри кристалів*

- Тема 1.* Коливальні спектри. Спектри коливань лінійного періодичного ланцюжка. Акустична і оптична гілки коливань.
- Тема 2.* Спектр коливань тривимірної кристалічної ґратки. Закон дисперсії фонів у твердих тілах.

### *Розділ 4. Теорія груп та симетрія кристалів*

- Тема 1.* Основні поняття теорії груп. Теорія незвідних представлень груп.
- Тема 2.* Характери незвідних представлень. Точкові групи симетрії. Теорема Вігнера. Аналіз коливань молекул по незвідним представленням точкових груп.
- Тема 3.* Просторова група симетрії. Незвідні представлення групи трансляції і просторової групи. Група хвильового вектора.
- Тема 4.* Аналіз коливань кристалів по незвідним представленням просторових груп. Перша зона Бріллюена.

*Розділ 5. Взаємодія світла з коливаннями кристалічної ґратки*

*Тема 1.* Спектри поглинання й умови їх виникнення. Фундаментальні смуги відбивання. Спектри комбінаційного розсіювання світла. Внутрішні та зовнішні коливання. Правила відбору.

*Тема 2.* Розсіяння Мандельштама–Бріллюена. Багатофотонні спектри поглинання.

*Розділ 6. Енергетичний спектр електронів у твердих тілах*

*Тема 1.* Основи зонної теорії твердих тіл. Адіабатичне наближення. Одноелектронне наближення. Метод Хартрі–Фока. Одноелектронне рівняння Шредінгера. Модель Зомерфельда. Наближення майже вільних електронів. Закон дисперсії електронів в зоні Бріллюена. Методи обчислення рівнів енергії у напівпровідниках.

*Розділ 7. Екситони у напівпровідниках та діелектриках*

*Тема 1.* Загальні уявлення. Екситони Френкеля. Давидовське розщеплення. Екситони Ваньє–Мотта. Екситони у напівпровідниках. Теорія Елліотта екситонних спектрів поглинання. Екситони у лужно-галоїдних кристалах. Екситони у анізотропних кристалах.

### 3. Структура навчальної дисципліни

| Назви розділів і тем  | Кількість годин |              |    |      |       |    |              |              |    |      |       |    |
|---|-----------------|--------------|----|------|-------|----|--------------|--------------|----|------|-------|----|
|   | денна форма     |              |    |      |       |    | заочна форма |              |    |      |       |    |
|   | усьо<br>го      | у тому числі |    |      |       |    | усього       | у тому числі |    |      |       |    |
| л   |                 | п            | л. | інд. | с. р. | л  |              | п            | л. | інд. | с. р. |    |
| 1   | 2               | 3            | 4  | 5    | 6     | 7  | 8            | 9            | 10 | 11   | 12    | 13 |
| <b>Розділ 1. Структура та сили зв'язку у твердих тілах</b>          |                 |              |    |      |       |    |              |              |    |      |       |    |
| Тема 1  | 7               | 2            |    |      |       | 5  |              |              |    |      |       |    |
| Тема 2  | 7               | 2            |    |      |       | 5  |              |              |    |      |       |    |
| Разом за розділом 1   | 14              | 4            |    |      |       | 10 |              |              |    |      |       |    |
| <b>Розділ 2. Оптичні властивості та спектри металів</b>             |                 |              |    |      |       |    |              |              |    |      |       |    |
| Тема 1  | 10              | 2            | 2  |      |       | 6  |              |              |    |      |       |    |
| Разом за розділом 2   | 10              | 2            | 2  |      |       | 6  |              |              |    |      |       |    |
| <b>Розділ 3. Коливальні спектри кристалів</b>                       |                 |              |    |      |       |    |              |              |    |      |       |    |
| Тема 1  | 9               | 2            | 2  |      |       | 5  |              |              |    |      |       |    |
| Тема 2  | 9               | 2            | 2  |      |       | 5  |              |              |    |      |       |    |
| Разом за розділом 3   | 18              | 4            | 4  |      |       | 10 |              |              |    |      |       |    |
| <b>Розділ 4. Теорія груп та симетрія кристалів</b>                  |                 |              |    |      |       |    |              |              |    |      |       |    |
| Тема 1  | 11              | 3            | 2  |      |       | 6  |              |              |    |      |       |    |
| Тема 2  | 12              | 3            | 3  |      |       | 6  |              |              |    |      |       |    |
| Тема 3  | 12              | 3            | 3  |      |       | 6  |              |              |    |      |       |    |
| Тема 4  | 11              | 3            | 2  |      |       | 6  |              |              |    |      |       |    |
| Разом за розділом 4   | 46              | 12           | 10 |      |       | 24 |              |              |    |      |       |    |
| <b>Розділ 5. Взаємодія світла з коливаннями кристалічної ґратки</b> |                 |              |    |      |       |    |              |              |    |      |       |    |
| Тема 1  | 10              | 3            | 2  |      |       | 5  |              |              |    |      |       |    |
| Тема 2  | 8               | 3            |    |      |       | 5  |              |              |    |      |       |    |
| Разом за розділом 5   | 18              | 6            | 2  |      |       | 10 |              |              |    |      |       |    |

| Назви розділів і тем  | Кількість годин |              |    |    |      |       |              |              |    |    |      |       |
|---|-----------------|--------------|----|----|------|-------|--------------|--------------|----|----|------|-------|
|   | денна форма     |              |    |    |      |       | заочна форма |              |    |    |      |       |
|   | усьо<br>го      | у тому числі |    |    |      |       | усього       | у тому числі |    |    |      |       |
|   |                 | л            | п  | л. | інд. | с. р. |              | л            | п  | л. | інд. | с. р. |
| 1   | 2               | 3            | 4  | 5  | 6    | 7     | 8            | 9            | 10 | 11 | 12   | 13    |
| <b>Розділ 6. Енергетичний спектр електронів у твердих тілах</b> |                 |              |    |    |      |       |              |              |    |    |      |       |
| Тема 1  | 12              | 2            |    |    |      | 10    |              |              |    |    |      |       |
| Разом за розділом 6   | 12              | 2            |    |    |      | 10    |              |              |    |    |      |       |
| <b>Розділ 7. Екситони у напівпровідниках та діелектриках</b>    |                 |              |    |    |      |       |              |              |    |    |      |       |
| Тема 1  | 12              | 2            |    |    |      | 10    |              |              |    |    |      |       |
| Разом за розділом 7   | 12              | 2            |    |    |      | 10    |              |              |    |    |      |       |
| <b>Індивідуальні завдання</b>                                   |                 |              |    |    |      |       |              |              |    |    |      |       |
| <i>Курсова робота</i>   | 20              |              |    |    |      | 20    |              |              |    |    |      |       |
| <i>Усього годин</i>   | 150             | 32           | 18 |    |      | 100   |              |              |    |    |      |       |

#### 4. Теми семінарських занять

| № з/п | Теми  | Кільк. годин |
|-------|---|--------------|
| 1     | Обчислення характеристик поверхневих хвиль  | 2            |
| 2     | Обчислення залежностей частот акустичних і оптичних коливань лінійного періодичного ланцюжка атомів від хвильового числа      | 2            |
| 3     | Обчислення залежностей частот акустичних і оптичних коливань тривимірної кристалічної ґратки від компонент хвильового вектора | 2            |
| 4     | Обчислення представлень груп елементів симетрії кристалічної ґратки   | 2            |
| 5     | Аналіз коливань молекул по незвідним представленням точкових груп   | 3            |
| 6     | Аналіз коливань кристалів по незвідним представленням просторових груп  | 3            |
| 7     | Аналіз першої зони Бріллюена кристалічної ґратки з використанням незвідних представлень просторових груп                      | 2            |
| 8     | Використання теорії груп для визначення коливань кристалічної ґратки, дозволених та заборонених для взаємодії зі світлом      | 2            |
|       | Разом   | 26           |

#### 5. Завдання для самостійної роботи

| № з/п | Види, зміст самостійної роботи   | Кільк. годин |
|-------|--|--------------|
| 1     | Ознайомитись із основними особливостями спектрів поглинання металів, напівпровідників та діелектриків  | 5            |
| 2     | Ознайомитись із теорією Гайтлера та Лондона (квантова теорія ковалентних сил)  | 5            |
| 3     | Обчислити закон дисперсії поверхневого поляритону на границі розділу метала та діелектрика   | 6            |
| 4     | Розв'язати рівняння коливань одновимірного ланцюжку атомів, у якому чергуються атоми двох різних елементів. Вказати акустичну та оптичну гілки розв'язку | 5            |
| 5     | Вивчити властивості динамічної матриці та ознайомитись із класифікацією коливань у тривимірній кристалічній ґратці                                       | 5            |
| 6     | Скласти «таблицю множення» елементів групи симетрії $C_{3v}$   | 6            |

|    |   |     |
|----|---|-----|
| 7  | Скласти таблицю характеристик представлень групи симетрії $C_{3v}$  | 6   |
| 8  | Обчислити характер незвідного представлення групи трансляції  | 6   |
| 9  | Побудувати першу зону Бріллюена для гранецентричної кубічної ґратки   | 6   |
| 10 | Ознайомитись із впливом ангармонізму коливань кристалічної ґратки на форму фундаментальних смуг відбиття                | 5   |
| 11 | Ознайомитись із експериментальними даними щодо двофотонного поглинання кристалічною ґраткою                             | 5   |
| 12 | Ознайомитись із особливостями обчислення хвильових функцій багатоелектронного атома при застосуванні методу Хартрі–Фока | 10  |
| 13 | Ознайомитись із властивостями екситонів у напівпровідниках, у лужно-галогідних кристалах, в анізотропних кристалах      | 10  |
| 14 | Індивідуальне завдання (курсова робота)   | 20  |
|    | Разом   | 100 |

### 6. Індивідуальні завдання

| № з/п | Теми курсових робіт   |
|-------|---|
| 1     | Поверхневі електромагнітні хвилі  |
| 2     | «Акустичні» та «оптичні» гілки залежностей частот коливань кристалічної ґратки від хвильового числа             |
| 3     | Представлення груп елементів симетрії кристалічної ґратки   |
| 4     | Аналіз коливань молекул по незвідним представленням точкової групи  |
| 5     | Аналіз коливань кристалу по незвідним представленням просторової групи  |
| 6     | Побудова першої зони Бріллюена кристалічної ґратки  |
| 7     | Теорія груп та правила відбору коливань кристалічної ґратки, дозволених та заборонених для взаємодії зі світлом |
| 8     | Екситони Френкеля та Ваньє–Мотта  |

### 7. Методи навчання

1. Проведення лекційних занять
2. Проведення семінарських занять
3. Самостійна робота студентів з вивчення додаткових матеріалів з курсу

### 8. Методи контролю

1. Поточний контроль при проведенні семінарських занять
2. Індивідуальне завдання: курсова робота
3. Екзамен



### 9. Схема нарахування балів

| Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання |          |          |          |          |          |          | Індивідуальне завдання<br>(Курсова робота) | Разом | Екзамен | Сума |
|--|----------|----------|----------|----------|----------|----------|--|-------|---------|------|
| Поточний контроль при проведенні семінарських занять         |          |          |          |          |          |          |  |       |         |      |
| Розділ 1   | Розділ 2 | Розділ 3 | Розділ 4 | Розділ 5 | Розділ 6 | Розділ 7 |  |       |         |      |
|  | 4        | 8        | 20       | 4        |          |          | 24   | 60    | 40      | 100  |

Досягнення студентів з навчальної дисципліни «Спектроскопія твердого тіла» оцінюються в балах, загальна сума яких становить 100. Вона складається з 60 балів, які студент може отримати протягом семестру, та 40 балів, які може отримати при проходженні підсумкового контролю у вигляді екзамену.

60 балів протягом семестру – це 36 балів, що нараховуються при проведенні семінарських занять та 24 бали за курсову роботу.

Передбачається по 2 бали за кожну годину семінарського заняття, загалом 36 балів. Бали нараховуються при виконанні студентами поставлених завдань протягом заняття.

Курсова робота є індивідуальним завданням, яке студент виконує на протязі семестру і надає для оцінювання перед екзаменом. Курсові роботи оцінюються за шкалою 0–24 бали виходячи з їх відповідності завданням і повноти виконання.

Екзамен проводиться у письмовому вигляді шляхом написання студентами відповідей на запитання екзаменаційного білету. Кожен білет містить два запитання. Відповідь на перше запитання оцінюється за шкалою 0–15 балів, відповідь на друге – за шкалою 0–25 балів. Тобто максимальною оцінкою за екзаменаційну роботу є 40 балів.

### Шкала оцінювання

| Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру | Оцінка                              |                                  |
|--|-------------------------------------|----------------------------------|
|  | для чотирирівневої шкали оцінювання | для дворівневої шкали оцінювання |
| 90–100   | відмінно                            | зараховано                       |
| 70–89  | добре                               |                                  |
| 50–69  | задовільно                          |                                  |
| 1–49   | незадовільно                        | не зараховано                    |

## **10. Рекомендована література**

### **Основна література**

1. Ibach H., Luth H. Solid State Physics: An Introduction to Principles of Material Science, Fourth Edition. – Springer, Berlin, 2009. – 543 p.
2. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Jorio A. Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter. – Springer, Berlin, 2008. – 576 p.
3. Nye J. F. Physical Properties of Crystals. – Clarendon Press, 1985. – 352 p.
4. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. Eighth Edition. – Wiley, 2005. – 680 p.
5. Poulet H., Mathieu J.-P. Vibration Spectra and Symmetry of Crystals. – Gordon & Breach, 1976. – 571 p.

### **Допоміжна література**

1. Born M., Wolf E. Principles of Optics: Seventh Edition. – Cambridge University Press, 2020. – 992 p.