

## **Межатомные взаимодействия и связь в твердых телах**

**Кредиты: 3**

**Аннотация дисциплины:**

Даются физические основы понятий валентности и ковалентности, а также природа различных типов связи как в молекулах, так и в конденсированных фазах.

**Цель изучения дисциплины:**

Ознакомление с современными представлениями электронной теории твердых тел, включая теорию электронной структуры и влияния особенностей этой структуры на наблюдаемые свойства.

**Структура тем:**

1. Введение. Основные типы межатомных взаимодействий. Электронные оболочки атомов в свободном состоянии и в твердом теле. Взаимодействие между атомами или ионами с заполненными электронными оболочками. Взаимодействие ионов с заполненными оболочками.

2. Основные понятия теории валентности. Связывающие и антисвязывающие орбитали. Метод линейной комбинации атомных орбиталей. Кулоновский и обменный вклады в энергию. Распределение электронов на валентной связи и гибридные орбитали.

3. Основные типы связи. Молекулярные кристаллы. Ионные кристаллы. Энергия электростатического взаимодействия зарядов. Формулы Фурье-обращения в конечном объеме. Расчеты энергии связи в ионных кристаллах.

4. Металлическая связь. Энергия Маделунга для металлов. Кристаллы с ковалентной связью. Квази-одномерные и квази-двумерные системы со смешанной связью. Поверхности Ферми для свободных и почти свободных электронов. Метод ортогонализированных плоских волн. Псевдволновая функция и псевдопотенциал.

**Объем времени и виды учебной работы:**

Лекции – 34 часа, практические и семинарские занятия – 17 часов.

Составил профессор Зиненко В.И.