

Předmět **Teorie pevných látek** státních závěrečných zkoušek má tyto okruhy otázek:

1. Schrödingerova rovnice pro soustavu částic tvořících pevné látky. Adiabatická aproximace popisu podsystemů elektronů a jader, resp. iontů pevných látek. Jednoelektronová aproximace. Hartreeho - Fokova metoda autokonsistentního pole. Výměnná interakce mezi elektrony.
2. Blochova teorie pohybu elektronů v periodickém elektrickém poli krystalu. Brillouinovy zóny. Bornovy – Kármánovy podmínky pro konečný krystal. Pásový charakter energetického spektra elektronů. Tenzor reciproké efektivní hmotnosti elektronů a děr. Fermiho energie, Fermiho plocha. Základní charakterizace látek podle hustoty kvantových stavů elektronů.
3. Metody přibližného popisu vlnové funkce a energie elektronů v periodickém elektrickém potenciálu. Metoda téměř volných elektronů. Metoda těsně vázaných elektronů. Metoda rozšířených rovinných vln (APW). Metoda ortogonalizovaných rovinných vln (OPW). Metoda pseudopotenciálů.
4. Teorie funkcionálu elektronové hustoty (DFT), variační teorém Hohenberga a Kohna, Kohnovy-Shamovy rovnice, aproximace lokální hustoty (LDA).
5. Lokalizované stavy elektronů v krystalech s poruchami. Popis elektronů pomocí Wannierových funkcí. Mělké a hluboké lokalizované hladiny v energetickém spektru elektronů. Donorové a akceptorové stavy elektronů v polovodičích. Excitony.
6. Dynamika jednoduché a složené krystalické mřížky. Harmonická aproximace kmitů iontů. Akustické a optické vlnové větve. Normální souřadnice kmitající krystalové mříže. Kvantová teorie hamiltoniánu nezávislých harmonických oscilátorů. Kreační a anihilační operátory kvazičástic fononů. Boseho statistika fononů a termodynamika krystalů. Tepelná kapacita krystalů. Anharmonismus kmitů iontů a teplotní roztažnost pevných látek.
7. Interakce vodivostních elektronů s fonony. Elektrická vodivost. Polarony. Elektronový plyn s coulombovskou interakcí. Plazmony.
8. Vlastnosti souboru vodivostních elektronů ve statistické rovnováze. Nerovnovážná rozdělovací funkce. Boltzmannova kinetická rovnice. Základní transportní jevy ve vnějších polích.
9. Topologické vlastnosti pevných látek. Berryho křivost v reciprokém prostoru a její vliv na transport elektronů. Chernovy náboje a Berryho křivost v systému popsaném dvouhladinovým hamiltoniánem.
10. Teorie lineární odezvy. Disperze a absorpce elektromagnetického záření v pevných látkách. Mezipásové a vnitropásové optické přechody v pevných látkách.

Obsah tohoto předmětu státních závěrečných zkoušek je dán předměty studijního programu:

11TPL1,2 -Teorie pevných látek 1, 2

11STPL - Seminář z teorie pevných látek

11SIKL – Počítačové simulace kondenzovaných látek