

**دانشگاه شهید چمران اهواز**  
**معاونت آموزشی و تحصیلات تکمیلی**

**طرح درس ویژه درس های تحصیلات تکمیلی دانشگاه**

نام و نام خانوادگی استاد: حمدا..صالحی	مرتبه علمی: دانشیار	آدرس ایمیل: salehi_h@scu.ac.ir
دانشکده: علوم	گروه: فیزیک	نیمسال تحصیلی: اول ۹۸-۹۹
دوره تحصیلی: دکتری فیزیک ماده چگال نظری	نام درس: موضوعات ویژه	تعداد واحد: ۳
<p style="text-align: center;"><b>جایگاه درس در برنامه درسی دوره:</b> این درس در راستای موضوع رساله می باشد و دانشجو با کارهای تحقیقاتی و روش های محاسباتی و تحلیلی آشنا می گردد.</p>		
<p style="text-align: center;"><b>هدف کلی:</b> ۱: آشنایی با نظریه تابعی چگالی و سامانه های بس ذره ای ارایه و بررسی مفاهیم بنیادی و پیشرفته ترین مطالب و مباحث جدید در زمینه های تحقیقاتی می باشد که قرار است دانشجو در آن زمینه موضوع رساله خود را انتخاب نماید.</p>		
<p style="text-align: center;"><b>اهداف یادگیری:</b> بررسی مفاهیم و نظریه های بنیادی در ساختار الکترونی و دردیگر ویژگی های مواد</p>		
<p style="text-align: center;"><b>رفتار ورودی:</b></p>		
<p style="text-align: center;"><b>مواد و امکانات آموزشی:</b> استفاده از مازیک و وایت برد.</p>		
<p style="text-align: center;"><b>روش تدریس:</b></p>		
<p style="text-align: center;"><b>وظایف دانشجو:</b></p>		
<p style="text-align: center;"><b>شیوه آزمون و ارزیابی:</b></p>		
<p style="text-align: center;"><b>منابع درس:</b></p> <p>1:R. M. Martin, "Electronic structure: basic theory and practical methods," Cambridge university press, (2004).</p> <p>2:J. Kohanoff, N. I. Gidopolos, " density Functional Theory : Basics, New Trends and Applications," Handbook of molecular physics and quantum chemistry,2, 532-568,(2003).</p> <p>۳: صالحی، حمداله " روش های محاسباتی در فیزیک حالت جامد"، انتشارات دانشگاه شهید چمران اهواز(۱۳۸۵).</p> <p>۴: صالحی، حمداله " بررسی مفاهیم و نظریه های بنیادی در ساختار الکترونی، انتشارات رسانه مکتوب(۱۳۹۴).</p>		

**هفته یکم (۹۸/۶/۲۹ تا ۹۸/۶/۲۳)**

حالت پایه الکترونی: ساختارهای مشخصه و نواری؛ حجم و فشار به عنوان متغیرهای اصلی  
مغناطیس شوندگی و برهم کنش الکترون-الکترون؛ فوتون ها و گذارهای فاز

**هفته دوم (۹۸/۶/۳۰ تا ۹۸/۷/۵)**

جنبش اتمی: انتشار و برهم کنش؛ آثار سطح؛ مواد نانو: بین ملکول ها و مواد چگال  
برانگیختگی الکترونی: ترازها و فاصله تراز؛ برانگیختگی های الکترونی: ظرفیت گرمایی، رسانایی و طیف نوری  
بررسی ویژگی های الکترونی؛ ساختاری و ابررسانایی  $MgB_2$

**هفته سوم (۹۸/۷/۶ تا ۹۸/۷/۱۲)**

همبستگی الکترون؛ معادلات پایه برای الکترون ها و هسته های برهمکنشی  
برهم کنش های کولنی در ماده چگال؛ قضایای نیرو و تنش؛ مکانیک آماری و ماتریس چگالی

**هفته چهارم (۹۸/۷/۱۳ تا ۹۸/۷/۱۹)**

تقریب الکترون مستقل؛ تبادلی و همبستگی؛ نظریه اختلال و قضیه  $2n + 1$   
ساختار بلوری؛ شبکه وارون و منطقه بریلوین؛ برانگیختگی ها و قضیه بلاخ؛ معکوس زمان و تقارن های معکوس

**هفته پنجم (۹۸/۷/۲۰ تا ۹۸/۷/۲۶)**

تقارن های نقطه ای؛ انتگرال گیری منطقه اول بریلوئن و نقاط خاص؛ چگالی حالت ها  
گاز الکترونی یکنواخت و فلزات ساده؛ تقریب های بدون برهم کنش و هارتری-فوک  
حفره و انرژی همبستگی؛ پیوند در فلزات دارای پیوند  $SP$ ؛ برانگیختگی ها و تابع دی الکترون لیندهارد

**هفته ششم (۹۸/۷/۲۷ تا ۹۸/۸/۳)**

نظریه تابعی چگالی و پیچیدگی های آن؛ روش کوهن - شم و حل معادلات آن؛ پیچیدگی های نظریه کامل کوهن -  
شم؛ نظریه تابعی چگالی مستقل از زمان و بیان تقریب های تابعی تبادلی-همبستگی  
نحوه انجام محاسبات خود-سازگار؛ نیرو و فشار

**هفته هفتم (۹۸/۸/۴ تا ۹۸/۶/۱۰)**

معادله شعاعی شرودینگر تک الکترونی؛ معادلات ذرات مستقل؛ پتانسیل های کروی  
اتم هایی با پوسته باز: پتانسیل های غیرکروی؛ معادله دیراک نسبیته و برهم کنش های اسپین - مدار  
تقریب کره اتمی در جامدات؛ دامنه های پراکندگی و شبه پتانسیل ها  
امواج تخت متعامد ( $OPWs$ ) و شبه پتانسیل ها و شبه پتانسیل های بارپایسته و فوق نرم

**هفته هشتم (۹۸/۸/۱۱ تا ۹۸/۸/۱۷)**

معادله شرودینگر ذره مستقل از زمان در پایه موج تخت؛ قضیه بلاخ و نوارهای الکترونی  
تقریب الکترون تقریباً آزاد؛ تقریب پتانسیل های شبه اتمی  
روش شبه پتانسیل تجربی؛ محاسبه چگالی الکترون: معرفی شبکه ها  
امواج تخت و شبکه ها؛ روش شبه پتانسیل های ابتدا به ساکن

### هفته نهم (۹۸/۸/۲۴ تا ۹۸/۸/۱۸)

بلورهای ساده: ساختارها، نوارها؛ ابر سلول‌ها: سطوح، لایه نازک، فونون‌ها، نقص‌ها  
خوشه‌ها و ملکول‌ها؛ اربیتال‌های جایگزیده: بستگی قوی؛ عناصر ماتریسی با اربیتال‌های اتمی  
نوارهای بستگی قوی؛ بررسی ساختار نواری نیم رساناها و فلزات واسطه  
حالت‌های الکترونی نانولوله‌ها

### هفته دهم (۹۸/۹/۱ تا ۹۸/۸/۲۵)

حل معادله کوهن-شم در پایه‌های جایگزیده؛ توابع پایه تحلیلی؛ روش‌های گاوسی؛  
انرژی‌های حالت پایه و برانگیخته  
امواج تخت بهبودیافته و مافین‌تین؛ روش نظریه پراکندگی چندگانه  
اربیتال‌های مافین-تین  
توابع بهبودیافته؛ روش‌های خطی  
شکل عمومی معادلات خطی شده  
امواج تخت بهبودیافته خطی؛ روش اربیتال مافین تین خطی  
بستگی قوی ابتدا به ساکن؛ پتانسیل کامل در روش‌های بهبودیافته

### هفته یازدهم (۹۸/۹/۲ تا ۹۸/۹/۸)

دینامیک‌های ملکولی؛ نیروهای ناشی از الکترون‌ها  
الگوریتم یکپارچه کار-پارینلو برای الکترون‌ها و یون‌ها؛ توصیف امواج تخت  
روش‌های جایگزین برای رسیدن به تابعی چگالی  
روش‌های دینامیک ملکولی کوانتومی غیرخودسازگار  
نمونه‌های شبیه‌سازی  
دینامیک شبکه از دیدگاه نظریه ساختار الکترونی  
رهیافت مستقیم: « فونون‌های منجمد؛ مگنون‌ها

### هفته دوازدهم (۹۸/۹/۹ تا ۹۸/۹/۱۵)

فونون‌ها و توابع پاسخ چگالی  
فرمول بندی تابع گرین  
اختلال‌های تناوبی و منحنی‌های پاشندگی فونون  
توابع پاسخ دی‌الکتریک، بارهای مؤثر  
برهم‌کش فونون - الکترون و ابررسانائی  
مگنون‌ها و توابع پاسخ اسپین

**هفته سیزدهم (۹۸/۹/۲۲ تا ۹۸/۹/۱۶)**

پاسخ های دی الکتریک برای ذرات غیربرهم کنشی

نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان

روش های تابع گرین وردشی برای پاسخ خطی دینامیکی

محاسبات صریح زمان حقیقی

توابع وانیه؛ تعاریف و ویژگی ها؛ توابع جایگزیده نامتعامل؛ توابع وانیه برای نوارهای درهم تنیده

**هفته چهاردهم (۹۸/۹/۲۹ تا ۹۸/۹/۲۳)**

قطبش؛ نظریه فاز بری هندسی قطبش

محاسبات قطبش در بلورها؛ جایگزیدگی

هندسه فاز بری ، نظریه امواج اسپینی

جایگزیدگی و مقیاس بندی خطی در سامانه های کوانتومی بس ذره ای

حل معادلات: روش های غیروردشی (توابع گرین و گشتاورها)

روش های توابع وانیه وردشی (تعمیم یافته)

ماتریس چگالی فاکتورگیری شده برای مجموعه پایه های بزرگ

**هفته پانزدهم (۹۸/۹/۳۰ تا ۹۸/۱۰/۶)**

بررسی فازهای فشاربالای ترکیب تلورايدجیوه

روش انجام محاسبات؛ بررسی خواص ساختاری

خواص الکترونی؛ اپتیکی؛ مدهای فونونی؛ ویژگی های گرمایی

بررسی ویژگی های ساختاری؛ الکترونی؛ اپتیکی؛ فونونی و گرمایی ترکیب گالیم فسفید در فازهای مختلف

**هفته شانزدهم (۹۸/۱۰/۱۳ تا ۹۸/۱۰/۷)**

ارائه سمینارها