

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (kodas)	Centras	Skyrius
Kietųjų kūnų fizika (10 ECTS kreditų)	Fizika N 002	Fizinių ir technologijos mokslų centras	Optoelektronikos skyrius
Studijų būdas	Valandų skaičius	Studijų būdas	Valandų skaičius
Paskaitos	40	Konsultacijos	
Individualus	200	Seminarai	10

Dalyko anotacija

Kurso tikslas – doktorantūros studijų lygmeniu pateikti vientisą ir sistemingą kristalinių kietųjų kūnų fizikinių savybių aprašą.

Kurse plėtojamas mikroskopinis kietųjų kūnų aprašymas, pradedant kristalų sandara ir simetrija, toliau nagrinėjant elektroninę sandarą, puslaidininkų fiziką, krūvininkų dinamiką, gardelės virpesius ir šiluminius reiškinius. Ypatingas dėmesys skiriamas ryšiui tarp mikroskopinių kvantinės mechanikos modelių ir eksperimentiškai stebimų kietųjų kūnų savybių. Pagrindinės kurso temos (ir apytikslis jų turinys): Kristalų sandara ir kristalografija (tolimoji tvarka ir periodiškumas, transliacinė ir taškinė simetrija, Bravais gardelės, primityvieji ir Wigner–Seitz elementarieji narveliai, taškinės grupės, kristalų klasifikacija, Miller indeksai, būdingos joninių, metalinių ir kovalentinių kristalų struktūros). Kristalofizika ir atvirkštinė erdvė (fizikinių dydžių tenzoriai, koordinacių transformacijos, Neumanno principas, įtempiai ir deformacijos, atvirkštinė gardelė, kristalografinės plokštumos, Brillouin zonos, periodinių struktūrų Fourier atvaizdavimas). Difrakcija kristaluose (rentgeno spindulių difrakcija, Laue lygtys ir difrakcijos sąlygos, Braggo dėsnis, difrakcijos interpretacija atvirkštinėje erdvėje ir pagrindiniai eksperimentiniai difrakcijos metodai). Mikroskopinis aprašymas ir cheminis ryšys kietuosiuose kūnuose (daugiadalelė Schrödingerio lygtis, adiabatinis / Born–Oppenheimer artinys, statinės gardelės artinys, tarpatominė sąveika, joninis, kovalentinis, metalinis ir van der Waals ryšys). Vienos dalelės elektroninės sistemos aprašymas (Hartree, Hartree–Fock ir tankio funkcionalo metodai, mainų sąveika, kvazidalelės ir jellium artinys). Elektronų dujos kietuosiuose kūnuose (Boltzmanno ir Fermio dujos, Fermi–Dirac statistika, būsenų tankis, Fermio energija, Sommerfeldo aprašymas, elektronų koreliacijos, Wigner kristalizacija ir Kulono sąveikos ekranavimas, įskaitant Debye–Hückel, Thomas–Fermi ir Lindhard metodus). Elektroninė juostinė sandara (Blocho teorema, Brillouin zonos redukcija, Kronig–Penney modelis, stipriojo ryšio ir beveik laisvų elektronų artiniai, Wannier funkcijos ir Fermio paviršiai). Juostinės sandaros analizės metodai (ląstelinis, APW, OPW, KKR, pseudopotencialo ir LMTO metodai, $k \cdot p$ metodas, efektyvioji masė, Kane ir Luttinger modeliai, puslaidininkų juostinės sandaros). Elektronų dinamika išoriniuose laukuose (kvaziklasikinės / WKB judėjimo lygtys, efektyviosios masės ir apvalkalo funkcijos artiniai, Wannier aprašymas, elektronai ir skylės). Puslaidininkiai (elementinių ir junginių puslaidininkų elektroninė sandara, seklūs ir gilūs priemaišų lygmenys, priemaišų būsenos, krūvininkų statistika, stipriai legiruoti puslaidininkiai ir izoliatoriaus–metalo virsmas). Elektrinio ir magnetinio lauko reiškiniai (elektrinis laidumas, dreifo greitis, judris, Blocho osciliacijos, klasikinis krūvininkų judėjimas magnetiniuose laukuose, Holo efektas, magnetovarža, Landau kvantavimas, sukinio skilimas, įmagnetinimas ir de Haas–van Alphen osciliacijos). Fononai ir gardelės dinamika (harmoninis artinys, normalieji virpesiai, vienmatės vienantomės ir dviatomės grandinės, akustiniai ir optiniai fononai, gardelės virpesių kvantavimas, infraraudonojoje srityje aktyvūs optiniai fononai ir polaritonai, trimatė gardelės dinamika, dinaminė matrica, poliarizacijos vektoriai, Bose–

Einstein statistika ir akustinių fononų aprašymas tampriosios terpės kontinuumo modeliu). Kietųjų kūnų šiluminė talpa (Dulong–Petit dėsnis, Einsteino ir Debye modeliai, žemų ir aukštų temperatūrų ribos bei elektronų ir fononų indėliai į šiluminę talpą). Eksperimentiniai fononų spektrų tyrimai (infraraudonųjų spindulių spektroskopija, netamprioji neutronų sklaida, Ramano ir Brillouin sklaida, akustooptiniai efektai ir balistinis fononų vaizdinimas). Anharmoniniai efektai ir šilumos pernaša (šiluminis plėtimasis, Grüneiseno teorija, fononų–fononų sąveika, atrankos taisyklės, normalieji ir Umklapp procesai, fononų ir elektronų indėliai į šiluminį laidumą, izotopinė sklaida ir ribų sąlygojama fononų pernaša).

Pagrindinė literatūra

1. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
2. P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors (Springer, 2002).
3. Paskaitų konspektai

Konsultuojantys dėstytojai	Mokslo laipsnis	Pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Andrea Zelioli	dr.		1. A. Zelioli, A. Špokas, B. Čechavičius, M. Talaikis, S. Stanionytė, V. Bukauskas, A. Vaitkevičius, A. Čerškus, P. Wojnar, V. Deibuk, E. Dudutienė, R. Butkutė, Comprehensive investigation of emission homogeneity of InGaAs multiple quantum wells using spatially resolved spectroscopy, Sci. Rep. 15, 32885 (2025). 2. A. Štaupienė, A. Zelioli, A. Špokas, A. Vaitkevičius, B. Čechavičius, S. Stanionytė, S. Raišys, R. Butkutė, E. Dudutienė, Internal quantum efficiency of GaAsBi MQW structure for the active region of VECSELs, Appl. Phys. Lett. 125, 221102 (2024). 3. A. Štaupienė, M. Jokubauskaitė, A. Zelioli, A. Špokas, M. Skapas, B. Čechavičius, R. Butkutė, E. Dudutienė, Improving optical properties through growth temperatures and post-growth annealing in parabolic GaAsBi/AlGaAs quantum wells, J. Alloys Compd. 1060, 187230 (2026). 4. A. Vaitkevičius, A. Špokas, A. Zelioli, U. Cibulskaitė, A. Bičiūnas, E. Dudutienė, B. Čechavičius, M. Skapas, A. Čerškus, M. Talaikis, P. Baranowski, P. Wojnar, R. Butkutė, Segregation-driven formation of bismuth quantum dots in parabolic GaAsBi/AlGaAs quantum structures, Surf. Interfaces 68, 106586 (2025). 5. A. Zelioli, J. Žuvelis, U. Cibulskaitė, A. Špokas, E. Dudutienė, A. Vaitkevičius, S. Stanionytė, B. Čechavičius, R. Butkutė, Optimization of AlGaAs barrier for InGaAs quantum wells emitting in the near infrared, Lith. J. Phys. 64(4), 244–252 (2024). 6. A. Špokas, A. Zelioli, A. Bičiūnas, B. Čechavičius, J. Glemža, S. Pralgauskaitė, M. Kamarauskas, V. Bukauskas, J. Spigulis, Y.-J. Chiu, J. Matukas, R. Butkutė, Optimising (Al,Ga)(As,Bi) quantum well laser structures for reflectance mode pulse oximetry, Micromachines 16, 506 (2025).

			7. I. Pliaterytė, L. Dundulis, J. Glemža, S. Pralgauskaitė, J. Matukas, A. Špokas, A. Zelioli, M. Kamarauskas, A. Bičiūnas, B. Čechavičius, R. Butkutė, Low Frequency Noise Spectroscopy of GaAsBi QW Structures for NIR Light Sources, Fluct. Noise Lett., 2640004 (2026).
Patvirtinta Fizikos mokslų krypties doktorantūros komitete 2026 m. rugsėjo 29 d., protokolo Nr. 5.2.2 E-15600-KT-3702			
Komiteto pirmininkas prof. Jūras Banys			