



Проблемы обоснования зонной теории

Выполнила: **ФИО**

Научный руководитель: **ФИО**



ЦЕЛЬ, ЗАДАЧИ

Цель – изучить зонную теорию твердых тел.

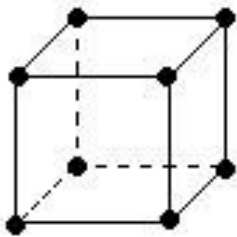
Задачи:

1. Изучить классификацию кристаллов.
2. Рассмотреть и проанализировать влияние периодического поля на состояние электронов в кристаллах.
3. Рассмотреть классификацию веществ (металлы, диэлектрики, полупроводники) по различным признакам.
4. Решить задачи повышенной сложности по теме ВКР.

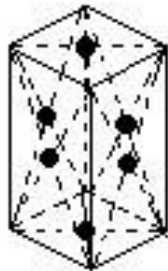
СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Кристаллические тела. Кристаллическая решетка

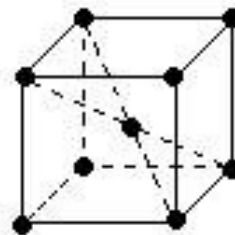
Основные типы кристаллических решеток металлов:



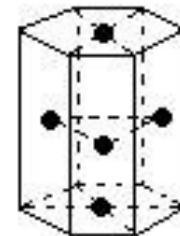
Кубическая
(1 атом на ячейку)



Объемно-центрированная
кубическая (2 атома на
ячейку)



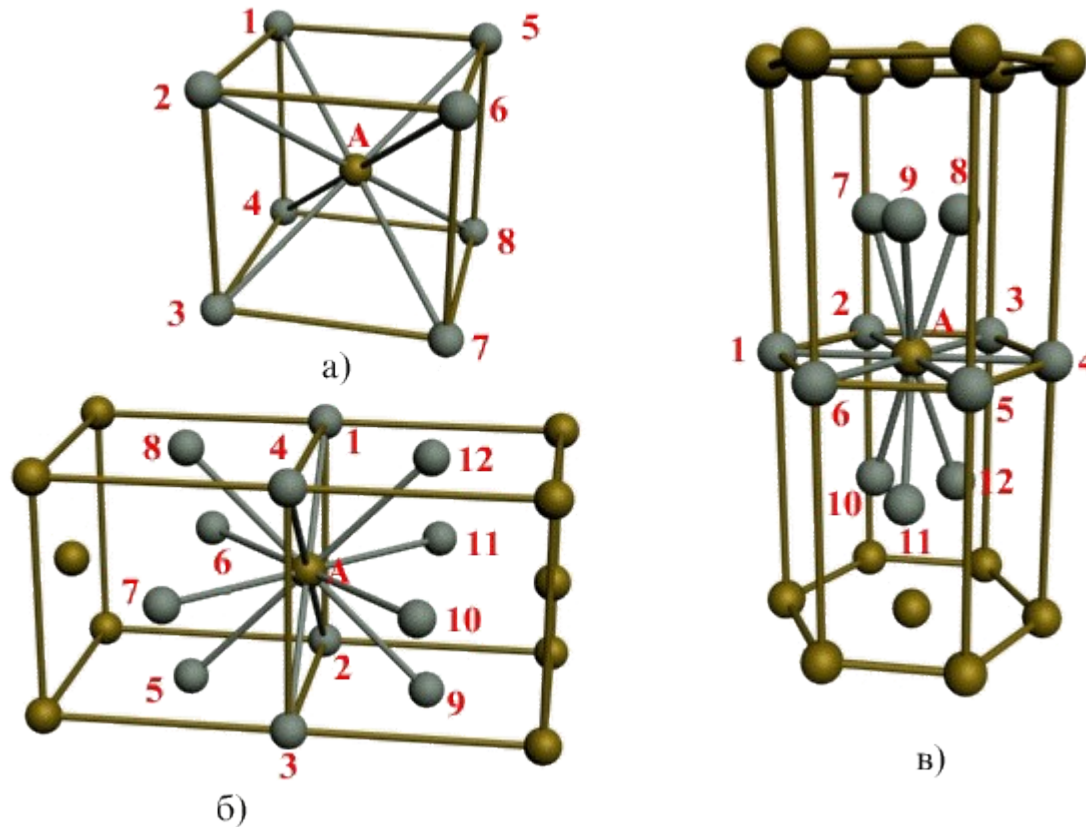
Гранецентрированная
кубическая (4 атома на
ячейку)



Гексагональная
плотноупакованная (6
атомов на ячейку)

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

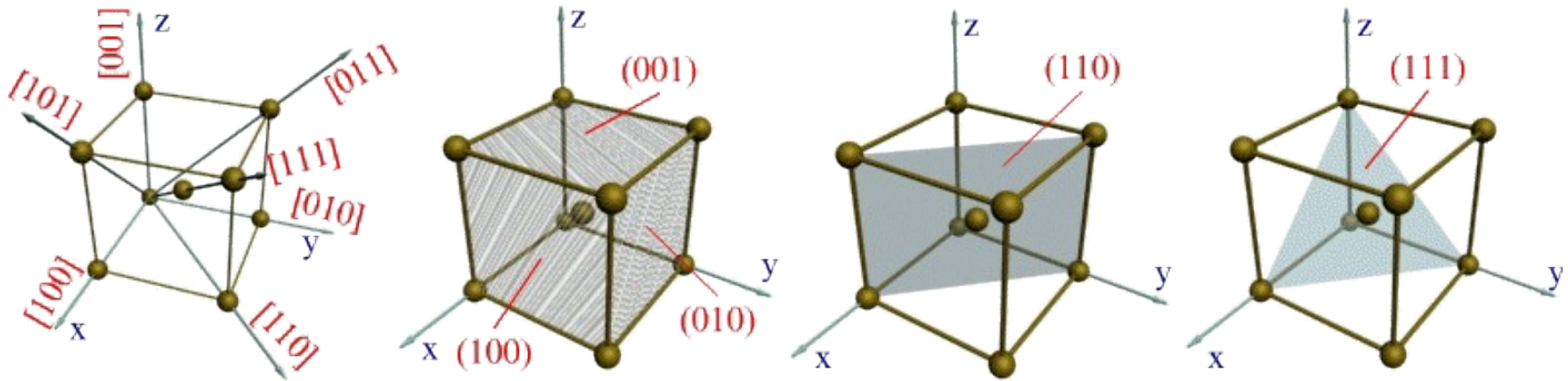
Кристаллические тела. Кристаллическая решетка



Координационное число в различных кристаллических решетках для атома А:
а) - объемноцентрированная кубическая (К8); б) - гранецентрированная кубическая (К12); в) - гексагональная плотноупакованная (Г12)

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

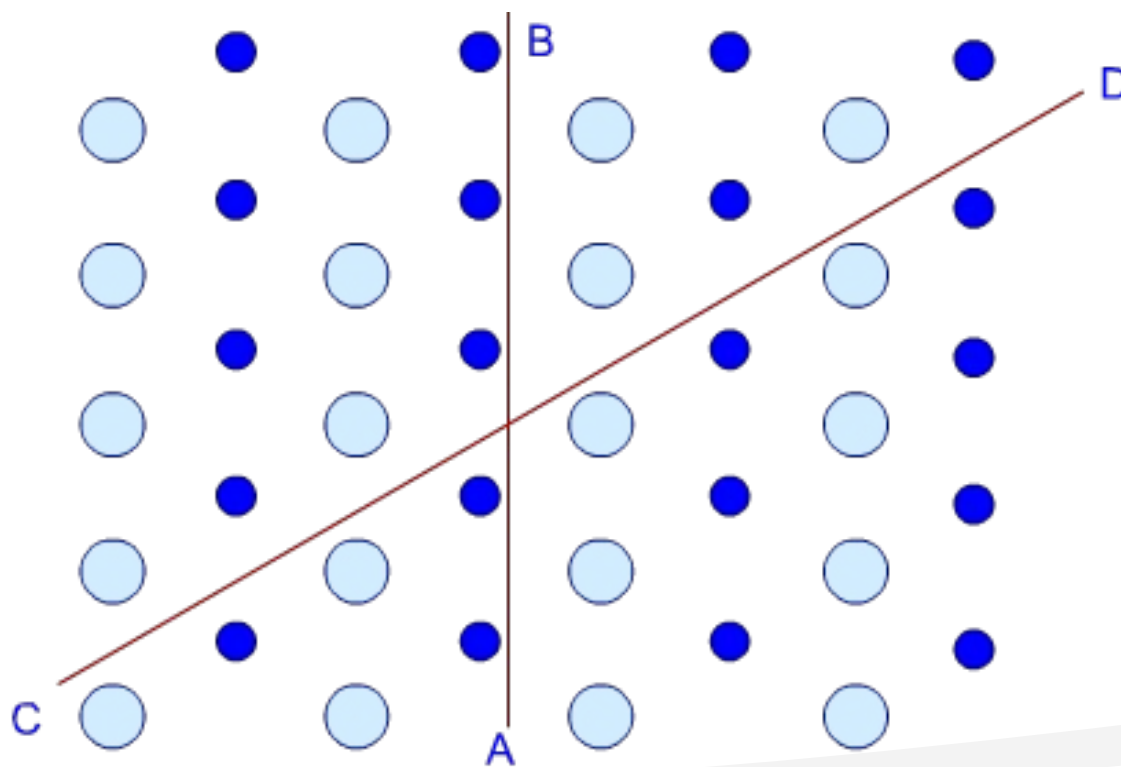
Кристаллические направления в плоскости



Кристаллографические направления и плоскости в кристаллической решетке: а) - основные направления и их обозначение; б), в), г) - основные плоскости и их обозначение

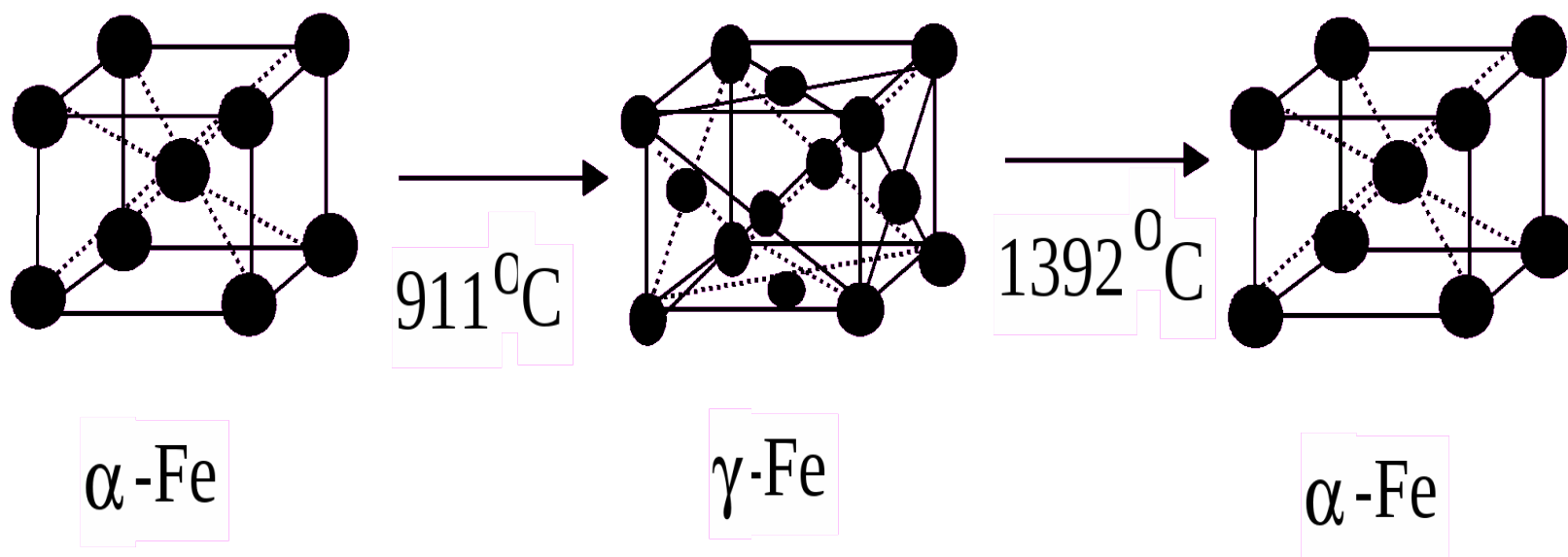
СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Анизотропия в кристаллах



СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Аллотропия металлов

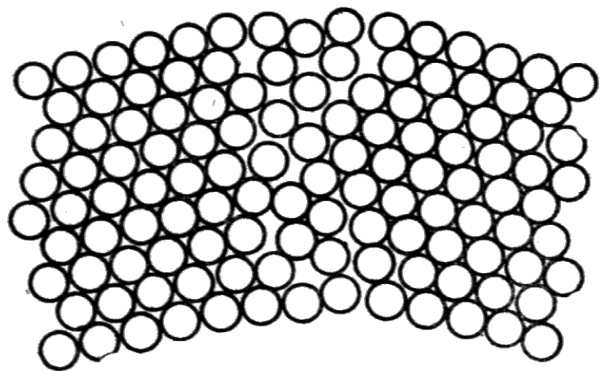


Аллотропия железа под воздействием температуры

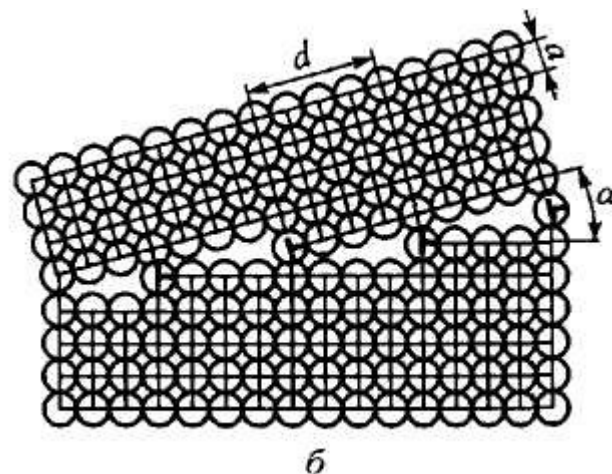
СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Дефекты кристаллической решетки металла

Поверхностные дефекты

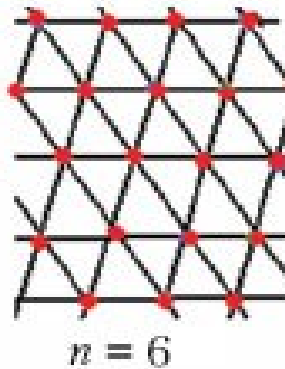
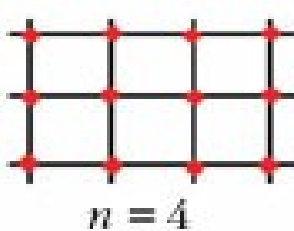
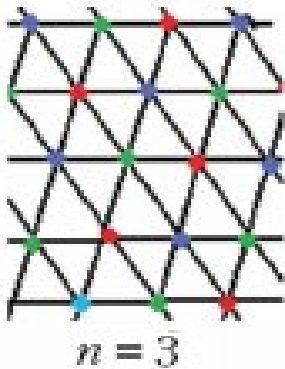
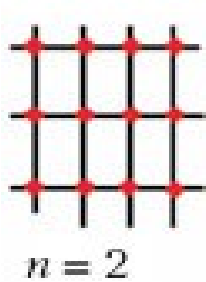


Объемные дефекты



СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Классификация решёток по симметрии



Оси 2-го, 3-го,
4-го и 6-го порядков

Триклинная система: $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

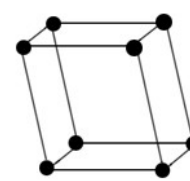
Моноклинная система: $a \neq b \neq c$; $\beta = \gamma = 90^\circ$, $\alpha \neq 90^\circ$

Тетрагональная система: $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

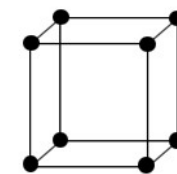
Ромбическая система: $a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Гексагональная система: $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$

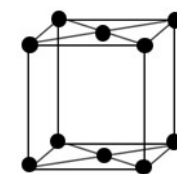
Кубическая система: $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



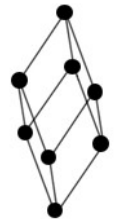
Триклинная



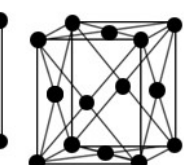
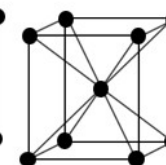
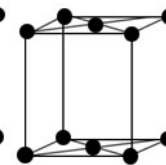
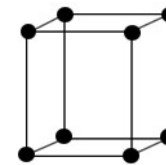
Моноклинная P



Моноклинная C



Тригональная



Ромбические P, C, I, F

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Обратная решетка

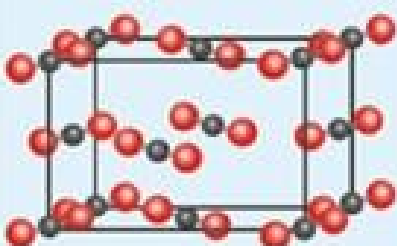
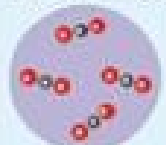
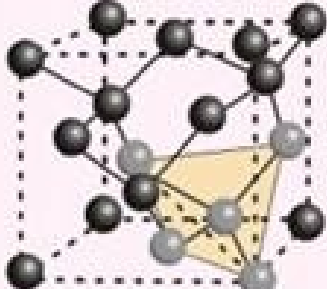
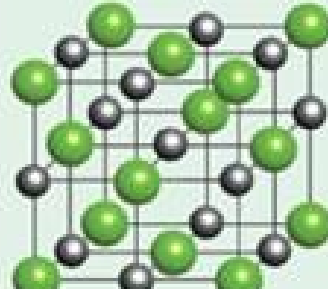
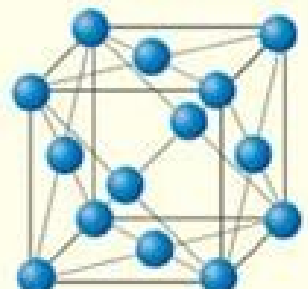
$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}, \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \cdot (a_3 \times a_1)},$$

$$b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot (a_1 \times a_2)}.$$

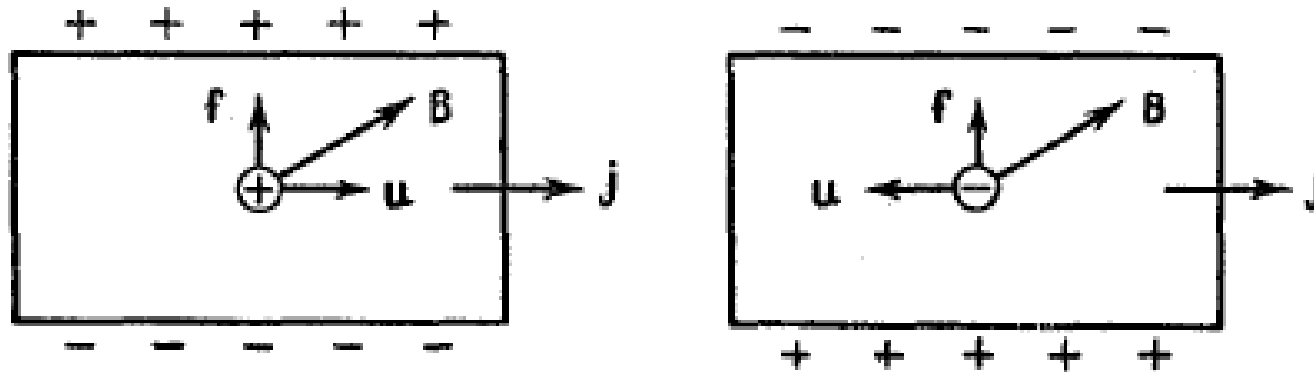
Основные векторы обратной решетки в физике твердого тела

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ

Классификация кристаллов по типу связей

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ CO_2	АТОМНЫЕ C	ИОННЫЕ NaCl	МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ Cu
 Углекислый газ  $t_{\text{кип}} -78^\circ\text{C}$ Твердая двуокись углерода 	 $t_{\text{пл}} 3500^\circ\text{C}$ $t_{\text{кип}} 4200^\circ\text{C}$ Алмаз 	 $t_{\text{пл}} 801^\circ\text{C}$ $t_{\text{кип}} 1465^\circ\text{C}$ Галит 	 $t_{\text{пл}} 1083^\circ\text{C}$ $t_{\text{кип}} 2567^\circ\text{C}$ Медь 

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ



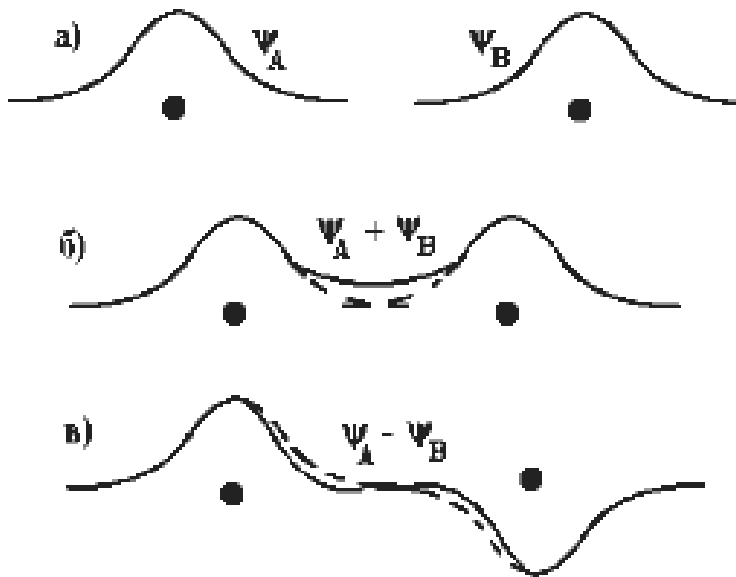
Движение электронов в периодическом поле кристалла

$$\Delta\psi(r) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - U(r)]\psi(r) = 0$$

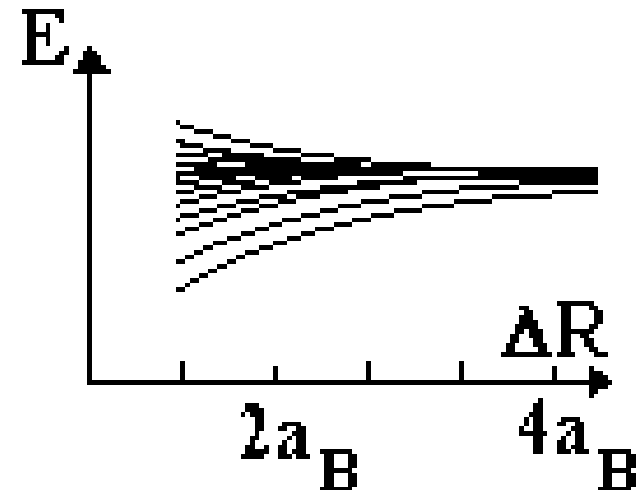
Уравнение Шредингера для кристалла

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Методы расчета зонной структуры.
Приближение сильной связи (tight binding approximation)



Метод линейной комбинации
атомных орбиталей



Расщепление атомных уровней
при сближении атомов

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Методы расчета зонной структуры.
Гамильтониан

$$H\psi(r) = (H_{at} + \Delta(U(r))\psi(r)) = E(k)\psi(r)$$

Модифицированный атомный гамильтониан H_{at}

$$\psi(r) = \sum_R e^{ikR} \Phi(r - R)$$

функции уравнения в общем виде
($\Phi(r)$ не совпадает с атомными функциями)

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Методы расчета зонной структуры

$$\Phi(r) = \sum_n b_n \psi_n(r)$$

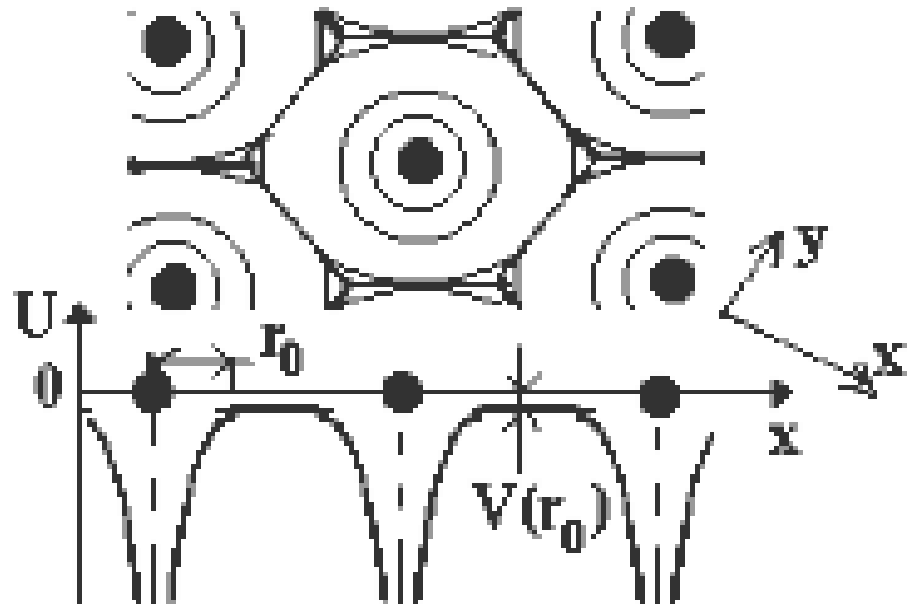
$$(E - E_n) \int \psi_m^* \psi dr = \int \psi_m^* \Delta U \psi dr$$

$$(E - E_m) b_m = A + B + C$$

$$A = -(E - E_m) \sum_n b_n \sum_{R \neq 0} e^{ikR} \int dr \psi_m^* \psi_n(r - R)$$

$$B = \sum_n b_n \int dr \psi_m^* \Delta U(r) \psi_n(r)$$

$$A = \sum_n b_n \sum_{R \neq 0} \int \psi_m^* \Delta U(r) \psi_n(r - R) e^{ikR} dr$$



Метод Вигнера-Зейца и МТ-потенциал

Функции Ванье

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Методы расчета зонной структуры.

$$\psi(r) = \psi_{k,E}(r) = \sum_G G_G \varphi_{k+G,E}(r)$$

$$E[\psi] = \int |\psi(r)|^2 dr$$

Метод присоединенных плоских волн (ППВ)

Вариационный принцип

$$\sum_R \int dr' \varphi_{k,E}(k)(r-r') V(r') \psi_k(r')$$

Метод гриновских функций Корринги, Кона, Ростокера (ККР)

$$\varphi_k = \exp(ikr) + \sum_c b_c \psi_k^c(r)$$

Метод ортогонализованных плоских волн (ОПВ)

$$V_{psevdo}(r) = U(r) + VR(r)$$

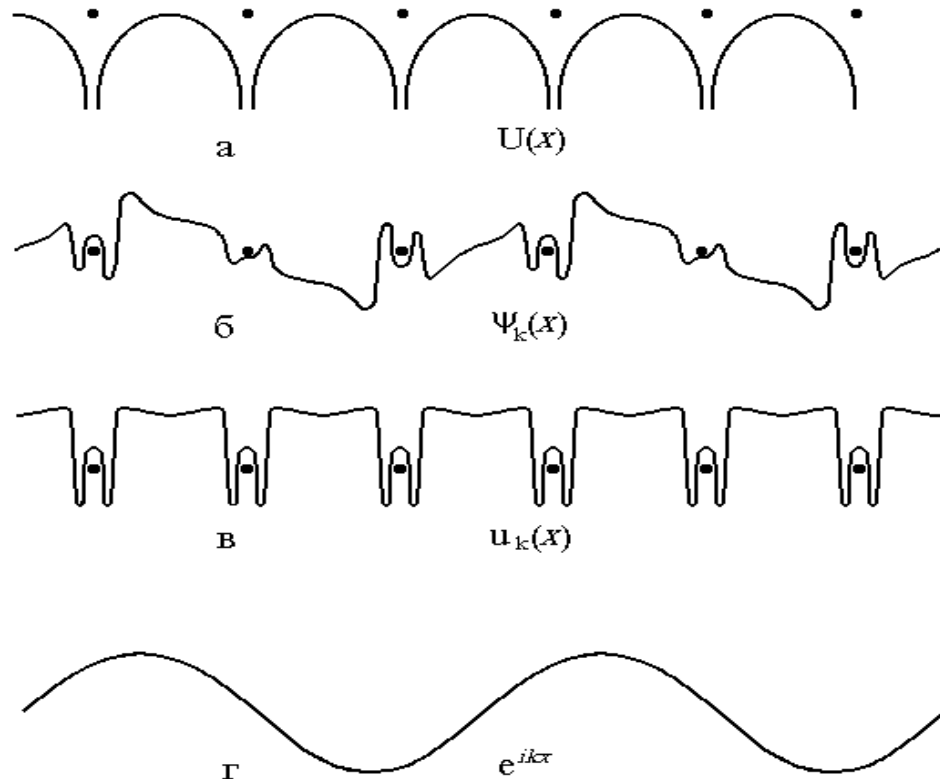
Метод псевдопотенциала

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Общие свойства волновой функции электрона в периодическом потенциале. Теорема Блоха

$$\psi_{n,k}(r) = U_{n,k}(r)e^{ikr}$$

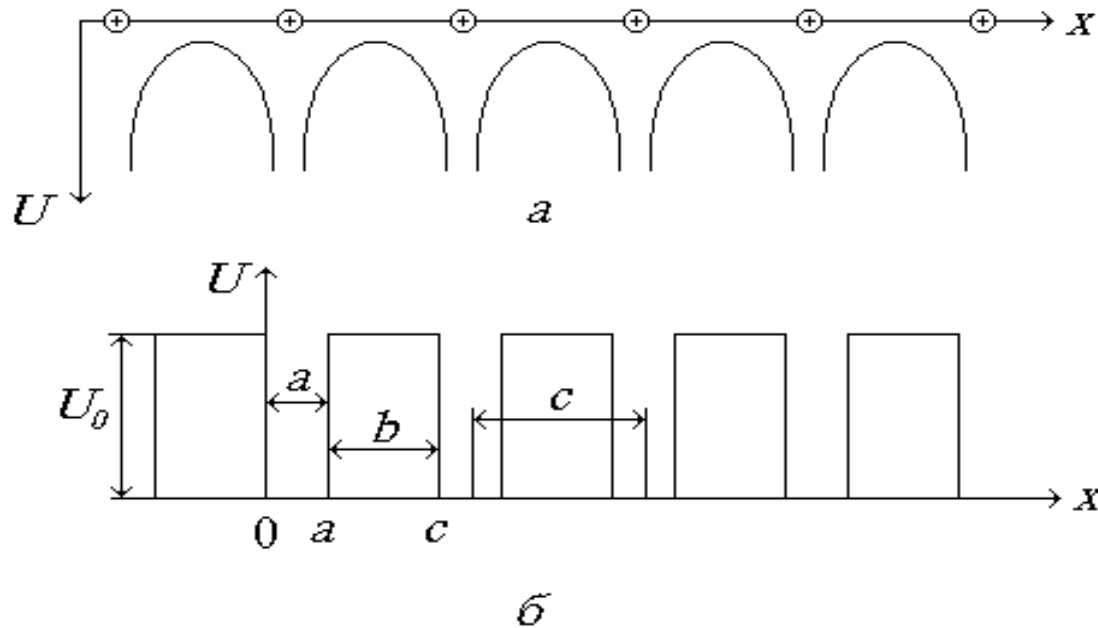
Теорема Блоха



Схематическое изображение электронных волновых функций в кристалле

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

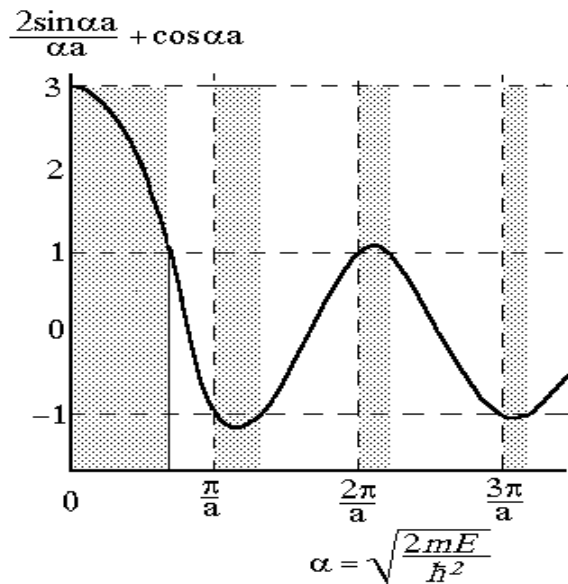
Модель Кронига-Пенни



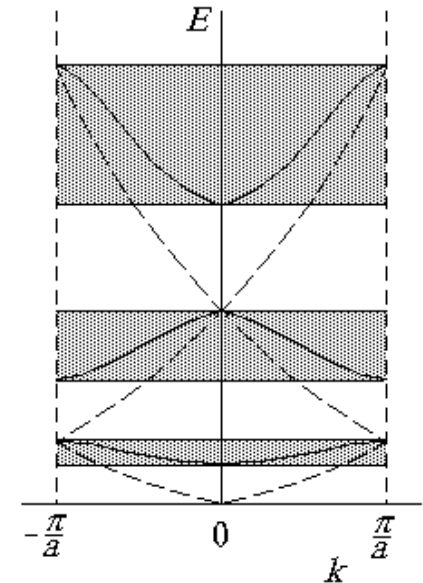
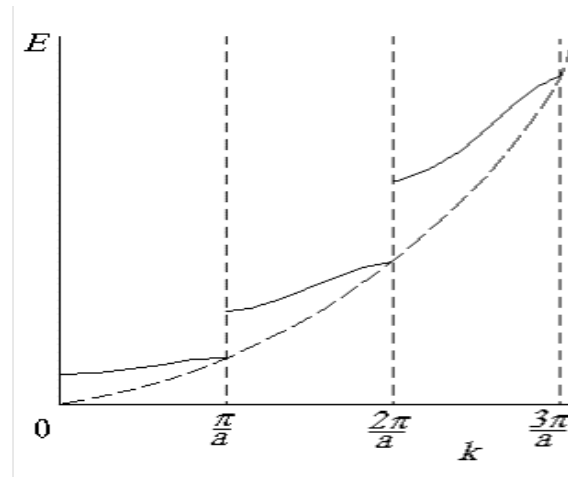
Изменение потенциальной энергии электрона:
 a - в реальном кристалле; b - в модели Кронига-Пенни

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Энергетические зоны в модели Кронига-Пенни



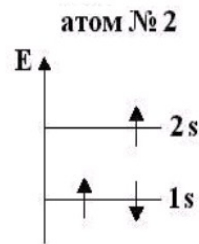
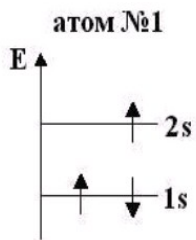
Зависимость энергии электрона от волнового числа для $p=2$ и $p=0$



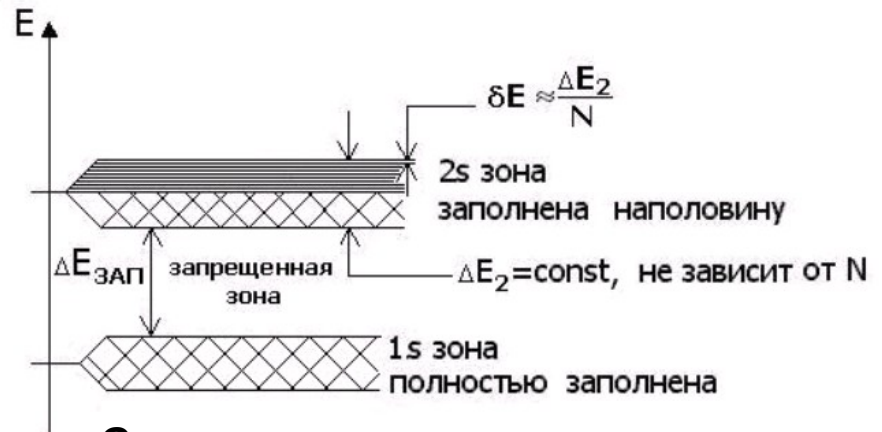
Энергия электрона как функция волнового числа в схеме приведенных зон Бриллюэна

ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

**Заполнение энергетических зон электронами.
Металлы, диэлектрики и полупроводники**

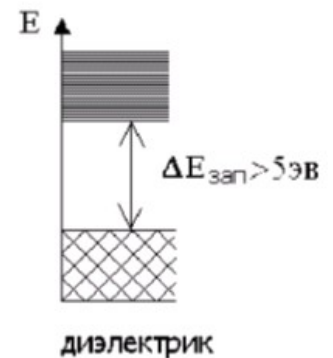
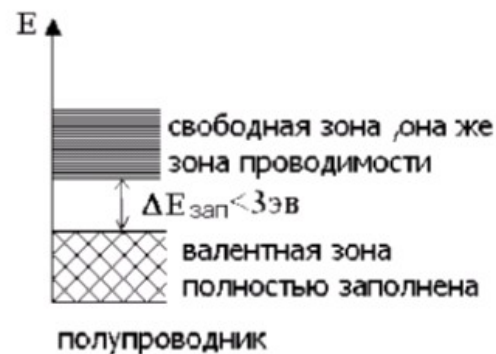
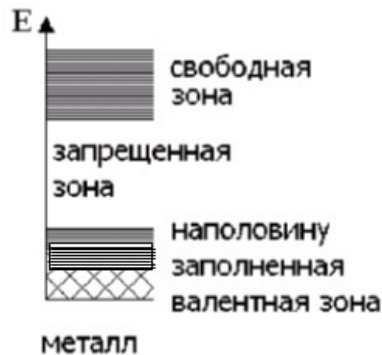


**Схемы энергетических уровней
двух изолированных атомов**



**Энергетическая схема системы,
состоящей из N атомов лития**

**Зонные схемы
металла,
полупроводника и
диэлектрика**

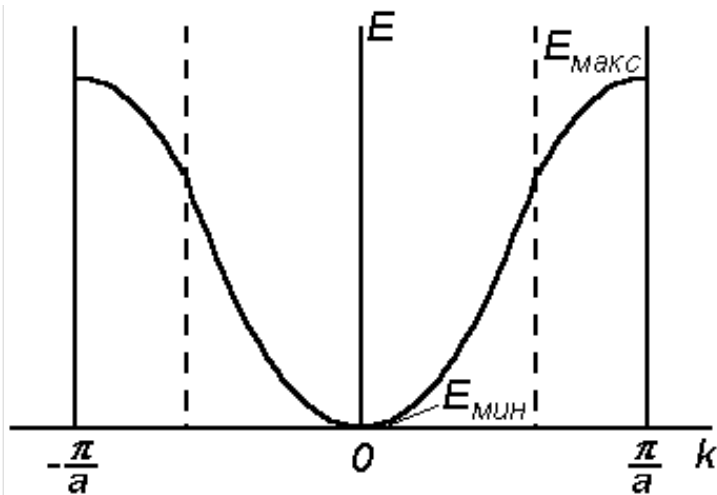


ПОНЯТИЕ О ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

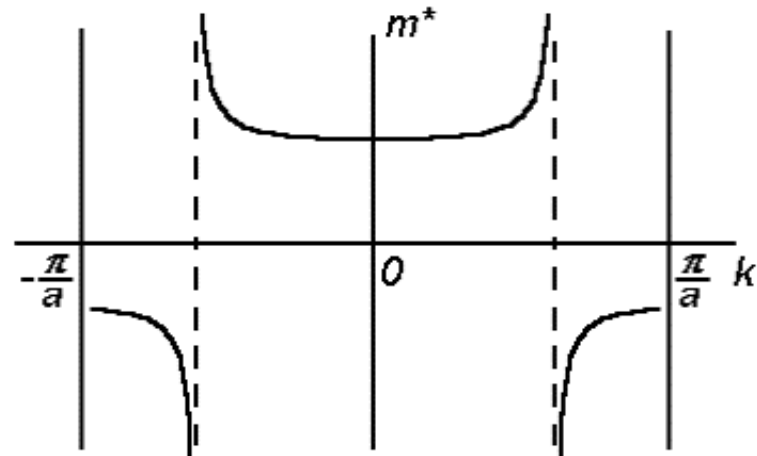
Эффективная масса электрона в кристалле и ее физический смысл

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)}$$

Эффективная масса электрона в кристалле



Закон дисперсии для электрона
в кристалле



Зависимость эффективной массы
электрона от волнового числа



Проблемы обоснования зонной теории

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!