

Слайд 1

Здравствуйте, уважаемые члены аттестационной комиссии!

Тема моей выпускной квалификационной работы - « _____ ».

Актуальность темы обусловлена изучением зонной теории, которая описывает движение электронов в кристаллах и является основой современной теории металлов, полупроводников и диэлектриков.

Слайд 2

Целью работы является изучение зонной теории твердых тел.

Для достижения поставленной цели выполнены 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.

Слайд 3

В первой главе работы изучена структура кристаллов: Основные типы кристаллических решеток металлов (кубическая, Объемно-центрированная кубическая, гранецентрированная кубическая, гексагональная плотноупакованная).

Слайд 4

Для разных форм типов кристаллических решеток рассмотрены координационные числа для атома А.

Слайд 5

Изучены кристаллографические направления и плоскости в кристаллической решетке.

Слайд 6

Раскрыто понятие анизотропии в кристаллах, как неодинаковости механических и других свойств в кристаллических телах вдоль различных кристаллографических направлений.

Слайд 7

Изучено явление аллотропии (полиморфизма), как свойство некоторых металлов (железо, титан, олово и др.) изменять кристаллическое строение, т. е. изменять тип элементарной ячейки своей кристаллической решетки. На слайде представлено изменение решетки кристалла железа под воздействием высоких температур.

Слайд 8

Рассмотрены виды дефектов в решетке кристаллов металла (точечные, линейные, поверхностные и объемные). Для оценки влияния дислокаций на прочностные характеристики металла используется плотность дислокаций, под которой принято понимать отношение суммарной длины дислокаций к объему содержащего их металла.

Слайд 9

Кристаллическая решетка может обладать различными видами симметрии. Дана классификация кристаллических решеток по симметрии (триклинная система, моноклинная, тетрагональная, ромбическая, гексагональная и кубическая).

Слайд 10

Рассмотрено понятие обратной решетки, определяемое векторами, представленными на слайде.

Слайд 11

По типу связей различают четыре класса кристаллов. На слайде дана их классификация на примере строения минералов: молекулярные (углекислый газ), атомные (алмаз), ионные (галит), металлические (медь).

Слайд 12

Во второй главе работы раскрыто понятие о зонной теории твердых тел. Изучено движение электронов в периодическом поле кристалла. Рассмотрено применение квантовой механики к описанию поведения электронов в твердых кристаллических телах, рассматривая кристалл как систему микрочастиц, которое требует решение уравнения Шредингера для системы частиц (электронов и ядер), образующих кристалл.

Слайд 13

Изучены методы расчета зонной структуры. Так, метод приближения сильной связи (ЛКАО) применим к тем случаям, когда перекрытие атомных волновых функций достаточно велико, чтобы приводить к необходимости введения поправок в представление об изолированных атомах, но в то же время не столь существенно, чтобы сделать атомное описание совершенно неправомерным. Метод используется для описания энергетических зон, возникающих из частично заполненных d-оболочек атомов переходных металлов, а также для описания электронной структуры диэлектриков.

Слайд 14

В соответствии с изложенным атомный гамильтониан H_{at} , собственными значениями и собственными волновыми функциями которого являются, соответственно, атомные E_n и ψ_n , удовлетворяющие уравнению Шредингера, должен быть модифицирован. Поиском собственных функций данного уравнения в общем виде считаем, что $\Phi(r)$ не совпадает с атомными функциями, и должна быть определена в ходе рассмотрения.

Слайд 15

Любая блоховская функция может быть представлена в виде разложения (2.5) по узлам решетки. При этом функцию $\Phi(r)$ называют функцией Ванье. Этот метод не применим к тем состояниям, которые хорошо описываются приближением почти свободных электронов.

Метод Вигнера-Зейца основан на решении уравнения Шредингера в одной элементарной ячейке CO , затем обобщается. В качестве ячейки берется элементарная ячейка Вигнера – Зейца, схематически представленная на слайде. Для устранения особенностей на границе ячейки вводят МТ-потенциал, в котором чисто атомный потенциал действует в сфере с центром в узле решетки и с радиусом r_0 , а вне этой сферы потенциал постоянен.

Слайд 16

Далее рассмотрены **методы**: присоединенных плоских волн (ППВ), вариационный принцип, эквивалентный уравнению Шредингера для присоединенных плоских волн, имеющих разрыв производной на границе между атомной и междоузельной областями, метод гриновских функций Корринги, Кона, Ростокера (ККР), метод ортогонализированных плоских волн (ОПВ) (когда желательно использовать немодифицированный потенциал) и метод псевдопотенциала (ПП) как обобщение метода ортогонализированных плоских волн.

Слайд 17

Изучены общие свойства волновой функции электрона в периодическом потенциале. Фундаментальные свойства волновой функции стационарного состояния определяются **теоремой Блоха**: собственные функции стационарного волнового уравнения с периодическим потенциалом имеют вид произведения функции плоской волны на функцию с периодичностью потенциала.

Слайд 18

В модели Кронига-Пенни ограничиваются рассмотрением одномерной задачи, в которой периодический потенциал заменяется цепочкой прямоугольных потенциальных ям.

Слайд 19

Наличие периодического потенциала приводит к появлению для энергии электрона таких интервалов, для которых нет волнового решения, соответствующего вещественным значениям волнового числа электрона. Результатом этого является чередование разрешенных и запрещенных зон энергии для электрона в кристалле.

Слайд 20

Рассмотрено образование энергетических зон на примере воображаемого процесса образования кристалла лития (щелочной металл) путем последовательного добавления атомов. Принцип Паули приводит к появлению новых состояний: энергетические уровни расщепляются на два подуровня. Величина расщепления уровней ΔE зависит от расстояния между атомами. При сближении атомов ΔE растет. Продолжая добавлять в нашу систему атомы, мы приходим к выводу, что для системы из N атомов каждый из уровней изолированного атома расщепляется на N подуровней.

Ниже на слайде приведены зонные схемы металла, полупроводника и диэлектрика.

Слайд 21

Особенности движения электронов в кристалле обусловлены их взаимодействием с кристаллической решеткой. Внешнее электрическое поле приводит к увеличению скорости электрона и, следовательно, его энергии. В соответствии с вторым законом Ньютона электрон в кристалле движется под действием внешней силы. Особенности эффективной массы электрона связаны с видом дисперсионного соотношения электрона в кристалле, что схематически представлено на слайде слева. Схематически зависимость эффективной массы электрона от его волнового числа показана на слайде справа.

Таким образом нами раскрыто понятие о зонной теории твердых тел.

Спасибо за внимание! Доклад окончен.