

УДК 539.2; 538.915; 541.57

На правах рукописи

Искакова Кульпаш Амановна

**МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ
ЭЛЕКТРОНОВ В УПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ**

01. 04. 07 – физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Актобе 2004

Работа выполнена в Карагандинском государственном университете имени Е.А. Букетова

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Кукетаев Т.А.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Джуманов С.

кандидат физико-математических наук
Тулепбергенов С.К.

Ведущая организация: Институт ядерной физики Национального
ядерного центра Республики Казахстан

Защита состоится «___»_____ 2004 г. в 15⁰⁰ на заседании
объединенного диссертационного совета ОК 14.61.14 в Актюбинском
государственном университете им. К. Жубанова по адресу:

Республика Казахстан, 463000 Актобе, пр. А. Молдагуловой, 34,
Актюбинский государственный университет им. К. Жубанова,
факс (3132) 567843, тел. (3132) 543707, e-mail: physcondens@ok.kz.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке
Актюбинского государственного университета им. К. Жубанова.

Автореферат разослан «___»_____ 2004 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физ.-мат. наук

Бекешев А.З.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Известно, что электрические и магнитные, термодинамические и другие свойства кристаллических твёрдотельных структур в целом определяются энергетическим состоянием электронно-ядерных систем и поведением электронных ансамблей во внутрикристаллических электромагнитных полях, имеющих периодичность решётки (электрон в периодическом потенциале). В этой связи решение задач количественного описания (а, следовательно, и прогнозирования) указанных выше свойств различных материалов зачастую упирается в наши возможности достаточно корректно описывать и экспериментально определять распределения энергетических уровней в различных структурах.

Задача расчёта структуры энергетических зон является одной из основных проблем физики твёрдого тела. Именно зонная теория служит теоретической основой для других физических моделей, позволяющих понять и объяснить многие физико-технические свойства твёрдых тел. В первую очередь это относится к кристаллам, которые находят широкое применение в современной вычислительной технике, микроэлектронике, и при производстве конструкционных материалов и т. д.

Вместе с тем расчёт энергетических зон твёрдых тел представляет весьма сложную математическую проблему. Связано это с необходимостью учёта взаимодействия бесконечного количества частиц (проблема многих тел) при определении потенциала. Вследствие этого для определения уровней энергии в классическом варианте теории требуется решать дифференциальные или интегральные уравнения относительно потенциала, представляемого в виде ряда с бесконечным количеством членов. Традиционно вычисление электронных потенциалов кристаллических структур ориентированно на использование численных методов. Общая черта традиционного подхода – неуниверсальность и ненадёжность результатов, несмотря на всё разнообразие применяемых численных методов [1]. Эти методы не позволяют создать модели кристаллов с примесями или дефектами, и тем более, модели миграции дефектов. Собственно по этой причине многочисленные формулировки зонной теории в кристаллах зачастую носят формально-математический характер и требуют использования ЭВМ на ранней стадии исследования.

Главным источником проблем во всех существующих методах расчёта зонной структуры твёрдых тел является то, что изначально вводятся предположения, которые оформляются в виде формально-математического описания, реализуются в виде программ и в результате получаются те же самые предположения, которые вносились первоначально. Никакой новой информации, помимо той, которая априорно предполагалась, не порождается. Очевидная бесперспективность этого подхода скрывается за запутанностью и колоссальной трудоёмкостью каждого цикла подобных работ.

Кроме вышесказанного, необходимо отметить, что в настоящее время для промышленности (например, электронной) требуются новые подходы к расчёту зон-

ных спектров, позволяющие предсказывать физические свойства твёрдых тел с малым количеством элементов (например, AsGa-полупроводниковые переходы), новых сплавов, композиционных материалов, не существующих в природе. Имеющиеся в распоряжении инженеров методы расчёта зонных спектров не могут решить современные проблемы промышленности из-за длительности и трудоёмкости расчётов и из-за отсутствия достаточной уверенности в правильности результатов. Поэтому сегодня требуются новые методы, заменяющие дорогостоящие физические эксперименты на математические модели твёрдых тел, дающие надёжные результаты [1]. Это особенно ярко видно на примере тех конструкционных материалов, которые ещё предстоит создать, когда физический эксперимент просто невозможен.

Казалось бы, что в качестве выхода из такого противоречивого состояния можно рекомендовать моделирование (например, численное) свойств твёрдых тел с использованием компьютерной техники. Однако и здесь есть свои проблемы: как свидетельствует длительный мировой опыт развития физики твёрдого тела, переложение традиционных численных методов расчёта в компьютерные модели может дать немного.

Но, к счастью, возможен и другой, в определённой степени феноменологический, подход к решению данной проблемы. Суть его заключается в следующем. Взаимодействием между электронами и между атомными остовами и электронами объясняются многие свойства твёрдого тела. На суперпозиции этих простых парных взаимодействий и основаны исследования энергетических зон. Однако на данный момент теоретически обоснованные зонные спектры имеются лишь для простых структур – чистых кристаллов. Теории, позволяющей рассчитывать зонные спектры твёрдых тел со сложной структурой, пока, к сожалению, не создано.

Следовательно, к настоящему времени созрела необходимость по иному (не традиционно) взглянуть на твёрдое тело как на сложную систему взаимодействующих объектов, а не простую суперпозицию простых парных взаимодействий элементов твёрдого тела.

Именно этот подход и развивается в данной диссертации: кристалл рассматривается как единая система всех составляющих его элементов, свойства которых определяются кристаллом-системой и отсутствуют вне кристалла в свободном состоянии; используется нелинейная суперпозиция взаимодействий этих элементов; не вносятся извне предположения о какой-либо структуре кристалла и его размерах. Известные из экспериментов свойства кристалла, например, периодичность в расположении элементов, должны получаться как следствие развиваемого подхода, а не постулироваться заранее.

В случае удачного развития данного теоретического подхода будет сделан определённый вклад в решение фундаментальной задачи определения энергетического спектра электронов в периодическом потенциале методами компьютерных технологий, что собственно, и определяет как актуальность, так и практическую важ-

ность работы.

Цель настоящей работы заключается в разработке методики точных кристаллических потенциалов и волновых функций, которые позволяли бы вычислять энергетические спектры электронных состояний в различных твёрдых телах без подгонки и использования корректирующих множителей. Предполагалось, что результаты расчётов будут апробированы на кристаллах меди, которые будут выступать в нашем случае в качестве модельной системы.

Для достижения указанной цели нам потребовалось решить следующие задачи:

1. Используя технологию компьютерного моделирования, получить форму кристаллического потенциала с учётом всех особенностей кристалла с гранецентрированной кубической структурой.
2. Обосновать модель междостовной решётки для определения волновой функции кристалла относительно объединённой решётки.
3. Выполнить расчёты энергетических уровней для гранецентрированных структур на основе волновых функций, полученных аналитическим способом; сопоставить результаты с данными других авторов.

Объекты и методы исследования. Методами технологии компьютерного моделирования исследованы энергетические зоны для металлических кристаллов, имеющих гранецентрированную кубическую структуру, с использованием обобщённого, развиваемого в работе, теоретического подхода и экспериментальных данных по литературным источникам.

Аналитические вычисления проведены с использованием специализированной программы аналитических вычислений «Derive», а синтез и моделирование исследуемых объектов разработанной методики осуществлялись на специально созданном комплексе программ моделирования кристаллических структур.

Научная новизна. В работе впервые:

1. Объяснены ограничения количества учитываемых атомов при определении кристаллического потенциала.
2. Сформулировано и использовано в конкретных расчётах для определённых материалов понятие междостовной решётки, предложены обоснованные модели квазисвязанных междостовных и остовных кристаллических решёток для металлов с ГЦК структурой.
3. Получена без первоначально налагаемых граничных условий и условий трансляции периодичность волновой функции с периодом решётки и функции энергии от волнового вектора с периодом обратной решётки.
4. На основе аналитического моделирования волновой функции для определённых уровней энергии и экспериментальных литературных данных предложены способы определения энергетической зоны для одномерного случая кристалла меди.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Метод расчёта периодического кристаллического потенциала, волновой функции и структуры энергетических зон без предположения о периодичности и без граничных условий.
2. Методы определения роли вкладов межостовной решётки в кристаллический потенциал, волновые функции и в зависящие от волнового вектора значения энергии.
3. Доказательство применимости данной методики не только для других периодических структур, но и для неупорядоченных систем.

Практическая ценность работы. Используемая в диссертационной работе методика расчёта волновых функций и энергетических спектров может быть применена для кристаллов произвольных элементов, кристаллов со сложной структурой, кристаллов с дефектами, твёрдых тел с любым, в том числе и малым, количеством элементов, для твёрдых тел с некристаллической структурой.

Апробация результатов работы. Основные положения исследований, изложенных в настоящей работе, были представлены и обсуждались на VI Международной конференции «Радиационные гетерогенные процессы» (Кемерово, 1995), IV научной Казахстанской конференции по физике твёрдого тела (Караганда, 1996), на международной научно-практической конференции (Караганда, 2001), на VII международном школе-семинаре (Усть-Каменогорск, Барнаул, 2003) и опубликована в 10 печатных работах.

Объём и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх разделов, заключения и списка литературы из 129 наименований. Работа изложена на 108 страницах печатного текста и включает 33 рисунков, 2 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дана постановка задачи, обоснована её актуальность и содержатся положения, выносимые на защиту.

1 Теоретические методы исследования зонной структуры

Первый раздел носит обзорный характер. В нем приведены основные литературные данные по теме диссертации. Определение энергетической зоны состоит из двух частей. Первая часть заключается в определении кристаллического потенциала, во второй части на основе этого потенциала определяется уровни энергии для построения поверхности Ферми. Уравнение Хартри-Фока для многочастичных задач сводится к одноэлектронному уравнению Шрёдингера [1–2]. Во всех разработанных численных методах уровни энергии определяются на основе секулярного уравнения. Рассмотрены преимущество и особенности каждого из численных методов расчёта энергетического спектра.

2 Моделирование кристаллического потенциала

Во втором разделе описывается способ получения кристаллического потенциала с учётом всех особенностей кристалла. В отличие от известных способов вычисления кристаллического потенциала, описанная в работе техника вычисления кристаллического потенциала является универсальной, даёт результаты без внесения корректировочных коэффициентов, не требует использования логарифмических и других неравномерных шкал, позволяет быстро рассчитать кристаллический потенциал для любых элементов заданной кристаллической структуры. Возможно, дальнейшее развитие такой техники в направлении учёта различных возмущений, что позволит ещё более точно вычислять электронный потенциал. Однако и без учёта тонких свойств кристалла получены достаточно точные результаты.

Моделью кристаллического потенциала служит ячеечный потенциал с корректирующим членом. Ячеечный потенциал представляется кулоновским потенциалом. Излагаются методы и результаты расчётов ячеечного потенциала для кристалла с ГЦК-структурой. Достигнуто хорошее приближение модельного потенциала к реальному потенциалу кристалла, что обсуждается и иллюстрируется в этом разделе. Получен точный портрет потенциала по любой траектории в кристалле без использования каких-либо численных методов. На рисунке 1 показан потенциал на линии окружности с центром в точке $(0,0,0)$ радиусом 10 с углами наклона плоскости окружности 30° относительно оси Ox и 75° относительно оси Oy . Этот результат показывает, что возможно вычисление по любой кривой линии потенциала. Этот

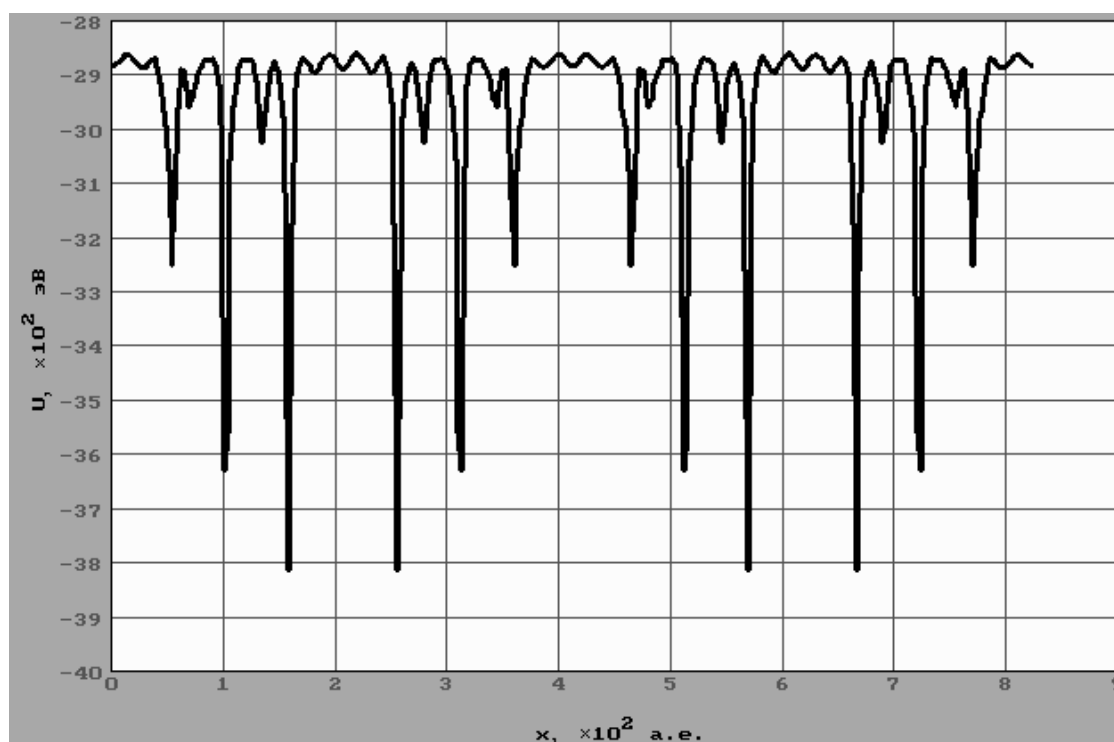


Рисунок 1 – Потенциал, по линии, проходящей по окружности с центром в точке $(0,0,0)$ радиусом 10 с углом наклона плоскости окружности 30° относительно оси Ox и 75° относительно оси Oy .

метод применим как для чистых материалов, так и для кристаллов с примесями, а также может использоваться для моделирования миграции дефектов в кристалле.

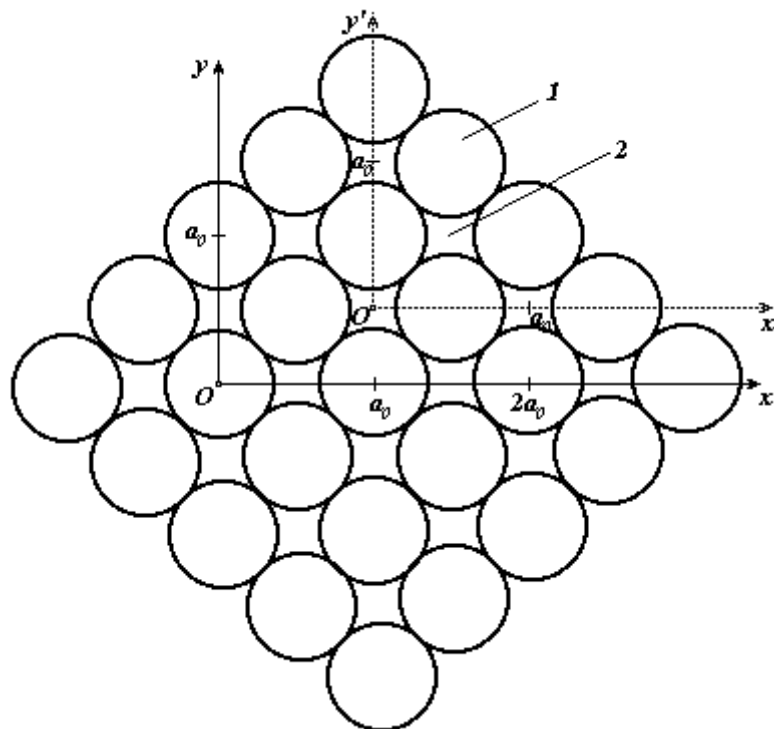
3 Волновая функция кристалла

В третьем разделе рассматривается геометрическая структура кристалла как структура, состоящая из двух слабосвязанных нелинейных физических объектов – остова и межостова. Концепция «остов-межостов» позволяет значительно упростить расчёты физических свойств кристаллов.

Ещё более естественен такой вывод, если не забывать, что атомные остовы кристаллической решётки – не точки в пространстве, а фигуры, занимающие значительную часть всего пространства кристалла и межостовное пространство, также имеют периодическую структуру, как и остовы. При этом период такой решётки совпадает с периодом обычной остовой решётки. На рисунке 2 показана двумерная решётка с постоянной решётки a_0 . Начало системы координат Oxy находится в центре одного из остовов, а начало системы координат $O'x'y'$ находится в центре одного из межостовов. Система координат $O'x'y'$ образуется трансляцией системы координат Oxy на $a_0\vec{n}/2$, где $n = \{0, 1, 2, \dots\}$.

При однородном распределении электронов в пространстве взаимодействие между ними становится энергетически невыгодным. Возникает возможность упорядоченного расположения электронов в пространстве, появления так называемого *вигнеровского* или «электронного кристалла».

Предсказанная Вигнером в тридцатые годы «электронная кристаллизация» экс-



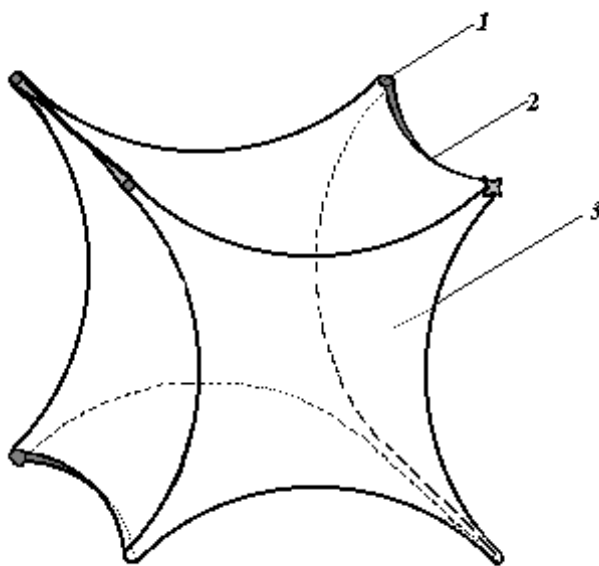
1 – остов; 2 – межостов.

Рисунок 2 – Остовы и межостовы двумерной решётки.

периментально подтвердилась в восьмидесятые годы – над поверхностью жидкого гелия наблюдается упорядоченное расположение электронов в виде электронной решётки.

Специфика твёрдого тела по сравнению с другими телами состоит в определяющей роли пространственно-структурных свойств: типа решётки, расположения и взаимодействия дефектов, структуры остовной и межостовой решёток. Период межостовой решётки совпадает с периодом остовной решётки. Пространственно-периодическая структура двух слабо связанных и разноимённо заряженных объектов является причиной устойчивости твёрдого тела – в данном случае металла – так как между этими объектами возникают пространственно-периодические кулоновские силы. В геометрической структуре каждый межостов окружён с шести сторон положительно заряженными ионными остовами, а ионный остов в свою очередь – межостовными промежутками. На рисунке 3 показано трёхмерное изображение одного межостова.

Рассматривается методика получения и моделирования волновой функции. Физические эксперименты строились исключительно с ориентацией на энергетический спектр, попыток построить волновую функцию на основе экспериментальных данных не было. Существуют построения волновой функции на основе теоретических разработок, ориентированных на численные методы. Но количество этих построений немногочисленно – опубликована волновая функция кристалла Na [3]. Других публикаций нет, хотя многие учёные отдают предпочтение получению реальной картины поведения волновой функции. Поэтому, в данном разделе



1 – остовное соединение; 2 – межостовное соединение; 3 – сферическая граница межостова и одного из шести окружающих остовов.

Рисунок 3 – Трёхмерный межостов ГЦК решётки.

результаты моделирования волновой функции сравниваются с экспериментальными данными через построение энергетического спектра.

Одним из преимуществ данного метода является получение периодической одномерной волновой функции без использования трансляционной периодичности в пространстве комплексных чисел. Примечательно то, что и мнимая, и вещественная части вычисляемой волновой функции без использования предположения об её периодичности получаются периодическими с периодом, равным постоянной решётки. Амплитуды волновых функции с возрастанием энергетических зон возрастают в узлах кристаллической решётки. Следовательно, возрастают плотности вероятности в этих точках. Это означает, что, чем выше энергия пробного электрона, тем ближе он может находиться в поле атомного остова.

4 Энергетические спектры

В четвёртом разделе описано определение энергетической зоны на основе найденной волновой функции. Получена энергетическая модель первых пяти состояний для меди в направлении [100]. Дано сравнение полученных в данной работе значений с экспериментальными данными и со значениями, даваемыми другими теоретическими методами.

Для меди наиболее близкие результаты, к экспериментальным данным, получены Сегалом и Бёрдиком с использованием, соответственно, метода присоединённых плоских волн (ППВ) и метода функций Грина. Поверхность Ферми, полученная Сегалом с использованием ППВ имеет, радиус полости R (или расстояние от точки Γ до точки K) равный

$$R = 0,97d,$$

где расстояние $\Gamma-L$ $d \approx 1,517108 \text{ см}^{-1}$. Из этого значения следует, что полость поверхности Ферми не сферическая, а вытянутая вдоль направления [100].

По расчёту Сегала ширина d -полосы для благородных металлов составляет 4 эВ. Вершина d -полосы локализована или в точке X (представление X_5), или в точке W (представление W'_1) примерно на 2 эВ ниже уровня Ферми.

Энергетический спектр меди вдоль направления [100], полученный Сегалом с использованием метода ППВ, и энергетический спектр меди в том же направлении, полученный Бёрдиком с использованием метода функции Грина, почти совпадают [4]. Оба спектра напоминают структуру зон для свободных электронов.

В меди верхний электронный слой состоит из одиннадцати электронов — $3d^{10}4s^1$. Для этих одиннадцати электронов необходимо шесть зон. Расчётные данные энергетических зон меди, полученные Бёрдиком показывают, что для всех волновых векторов $\vec{k}$, структура шести зон переходит в пятизонную структуру. Энергия пяти зон расположена в интервале от 2 до 5 эВ ниже энергии Ферми. Энергия шестой зоны колеблется от 7 до 9 эВ. Нижний порог энергии ниже энергии Ферми, верхний — выше энергии Ферми [4, 5]. Порог возбуждения электронов из зоны проводимости в верхние зоны достигает в той точке, где шейка поверхности Ферми

пересекает шестиугольную грань зоны Бриллюэна.

На рисунке 4 изображены совмещённые графики для первых пяти различных уровней энергии меди вдоль направления $[100]$, полученные остов-межостовным методом. Для сравнения на рисунке 4 совмещены линии энергетических уровней направления $[100]$, полученные остов-межостовным методом, методами ППВ и функции Грина. Из рисунка видно, что уровни энергии последних двух методов почти совпадают из-за общего подхода к определению маффинтиновского потенциала на границе атомного остова. Основной недостаток обоих методов состоит в том, что значение потенциала за пределами атомного остова принимается постоянным. Данный вывод для такого устойчивого объекта, как кристалл, является слишком сильной натяжкой. С другой стороны, например, в методе ортогонализованных плоских волн (ОПВ), учитывающее детали межостовного пространства, делается грубые допущения относительно атомного остова. Этих недостатков нет у остов-межостовного метода, в котором учитываются все детали как внутри, так и вне атомного остова, а кристалл рассматривается как целостная система остовов и межостовов. По остов-межостовой концепции отделение межостовов от остовов означает исчезновение системы-кристалла, и, соответственно, потерю адекватности любых способов расчёта свойств кристалла, так как в модели теряется целевой объект этих расчётов – кристалл.

Из рисунка 4 видно, что остов-межостовный метод даёт сходные с другими ме-

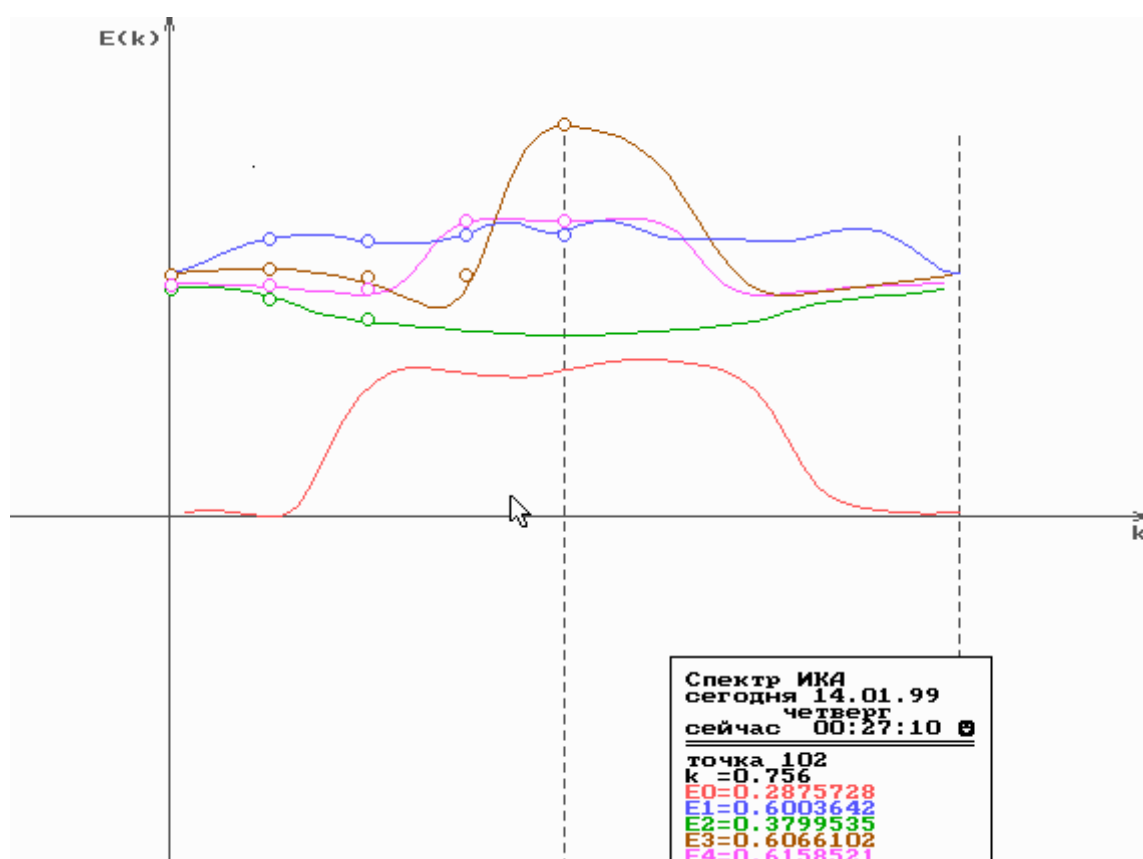


Рисунок 4 – Совмещённые графики различных уровней энергии.

тодами результаты, как в остовной, так и в межостовой области. Однако имеются и существенные различия, особенно в межостовой части, где остов-межостовой метод по определению более точен, чем методы ППВ и функций Грина [4, 5]. А в остовной области отличия связаны с тем, что межостовы (как элементы кристалла) влияют на свойства остонов, и это влияние невозможно рассчитать без комплексного остов-межостовного расчёта. По виду кривых на рисунке можно сделать вывод о том, что характер межостовного влияния хотя и сходен с предполагаемым влиянием обменного потенциала, но мощность этого влияния больше, а его детали совсем иные.

Результаты классических методов расчёта энергетических уровней как методы ППВ, ОПВ, линейной комбинации атомных орбиталей, псевдопотенциала и функции Грина удовлетворяют многим требованиям теории твёрдого тела, но не достигают основной цели расчётов – выяснения свойств кристаллов без ссылок на экспериментальный материал. А поскольку экспериментальные данные в физике твёрдого тела являются всегда косвенными, то и надёжность перечисленных методов по расчёту свойств кристаллов невысока. Извлечение информации о свойствах кристалла за счёт использования всё более сложных вычислительных методов и увеличения точности таких расчётов без корректировки модели физической природы кристалла означает постоянные корректировки в расчётах и необходимость постоянной сверки с экспериментальными данными, чем и страдают все имеющиеся методы расчёта зонной структуры кристаллов [6].

Эксперименты показывают, что во всех благородных металлах поверхность Ферми соприкасается с границами зоны в точках L (Каллуэй Дж, 1969; Крэкнелл А., 1978). Радиус шейки r , полученный методом, основанным на эффекте де Гааза-ван-Альфена, равен $0,18d$, а методом поглощения ультразвука – $0,17d$. Отношение поперечных сечений экстремальных орбит в осцилляциях де Гааза-ван-Альфена определяется соотношением

$$A_{111}(\text{«пузо»})/A_{111}(\text{«шейка»}) = 27.$$

Радиус полости R в направлении $[100]$ составляет $0,97d$. Для сравнения рассмотрим значения энергии переходов для меди в этом направлении, полученные экспериментально. Вследствие квазинепрерывного изменения $E_j(\vec{k})$ относительно $\vec{k}$ при прямых межзонных переходах в каждой энергетической зоне резкие края поглощения возникают лишь от переходов в точках, где $E_j(\vec{k})$ имеет максимум или минимум. Поэтому экстремальные точки возникают в точках симметрии зоны Бриллюэна. Сопоставление прямого межзонного перехода и коэффициента поглощения оптического спектра для меди в точке симметрии зоны Бриллюэна $X = 2\pi/a_0(1, 0, 0)$ даёт следующие результаты: значение энергии перехода из состояния $E_4(\vec{k})$ в $E_3(\vec{k})$ составляет 4,5 эВ, соответствующее переходу из состояния $E_3(\vec{k})$ в $E_0(\vec{k})$ значение энергии составляет 6,6 эВ. Результаты энергетических переходов, полученные методом остов-межостовного моделирования, коррелируют с резуль-

татами, полученными расшифровкой оптического спектра. На рисунке 4 кривые соответствуют результатам остов-межостовных расчётов, а кружочками показаны значения энергии, полученные из спектроскопических измерений коэффициента поглощения.

Изложенный подход к расчётам свойств твёрдых тел легко распространить и на любые, не обязательно периодические структуры, образующие твёрдые тела. Например, одну и ту же вычислительную схему можно использовать как для чистых кристаллов, так и для кристаллов с примесями или с нарушениями периодической структуры. Теперь остановимся на кристалле с очень небольшим количеством остовов. В таком кластере периодичность не столь идеальна, как в предыдущем случае. Моделирование такого кристалла представляет непроходимые трудности для традиционных методик, но именно этот случай взят нами в качестве основного демонстрационного варианта. Рассматриваемый объект далёк от идеального кристалла из-за ограниченности его размера. И несмотря на это, представленная нами методика показала периодичность вышеописанных параметров. При этом в наших задачах не использовались условие периодичности и теорема Блоха как необходимые исходные условия.

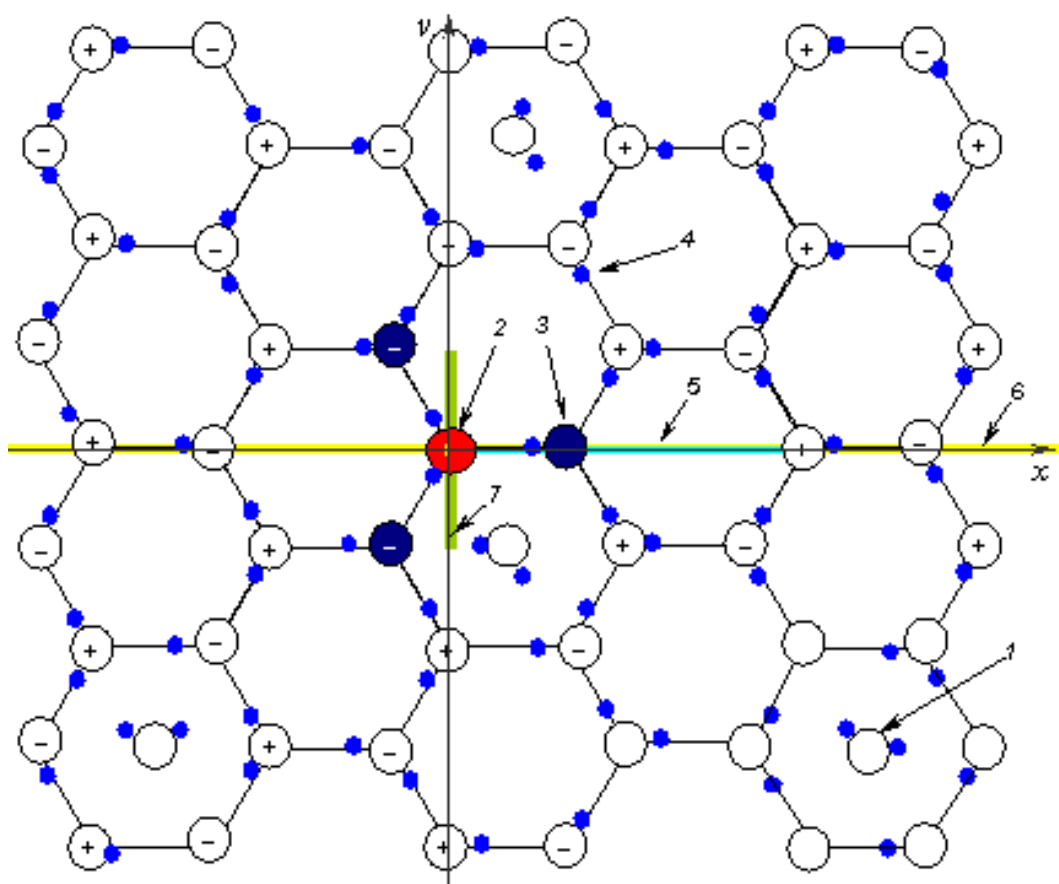
Почему такой эффект имеет место в предлагаемой нами методике? Потому, что в ней не закладывается трансляционная инвариантность в качестве основополагающей. Трансляция вообще не предполагается; она получается как побочный результат компьютерного моделирования средствами, понижающими аналитическую нагрузку на процессор. Именно по той же причине наша методика может успешно работать и в моделях твёрдого вещества, не имеющего периодичности свойств. Таким образом, отказ от постулирования трансляционной инвариантности позволяет расширить область применения данной модели для исследования материалов со сложной структурой, аморфных тел, и вообще, материалов, где нет периодического строения.

Например, вода – сложная ассоциированная жидкость, характеризующаяся неупорядоченным расположением молекул. В молекуле воды электроны находятся в $2s2p^3$ -гибридизованных орбиталях. Любое изменение структурной ориентации элементов молекулы воды приводит к резкому изменению физико-химических свойств воды как жидкости. По этой причине для воды-жидкости не может быть и речи о применении трансляционной инвариантности. Электропроводность воды и водных растворов электролитов, являющихся ионными проводниками, занимает промежуточное положение между диэлектриками и металлами. Относительно высокая электропроводность чистой воды объясняется большой подвижностью протонов, значение которой на порядок меньше её значения для электронов в металлах. Разница электропроводностей металлов и водных систем возникает за счёт низкой концентрации протонов по сравнению с электронами. Механизм электропроводности водных систем связан с их структурной организацией, образованной за счёт

водородных связей молекул воды. Нами предлагаются графики потенциалов воды, полученные с использованием остов-межостовного метода с учётом квантовомеханических и физических свойств молекул. На рисунке 5 изображена одна плоскость кластера гексагональной решётки воды с клатратами (свободными молекулами жидкости), построенной методом минимизации энергии.

На рисунке 6 приведен график потенциала льда по линии 6, которая проходит через центры пяти молекул по оси x . На рисунке 7 показан потенциал воды по той же линии. Для воды видны осцилляции, связанные с присутствием клатратных молекул.

Отдельный интерес представляет нарушение периодичности на границе кристалла. Фактически это присущее всем реальным кристаллам нарушение идеальной (т. е., бесконечной) кристаллической структуры. Нарушение идеальности кристалла на границе, бесспорно, влияет на теоретическое исследование зонного спектра. Граничные эффекты появляются в виде затухания фазовых портретов главных параметров (кристаллического потенциала, волновых функции и значений энергии в пространстве волновых векторов) по всем направлениям границы кристалла (в нашем случае сферической).



1 – протонный дефект; 2 – чётная молекула; 3 – нечётная молекула; 4 – протон.

Рисунок 5 – Плоскость гексагональной решётки воды с клатратами в виде молекулы воды.

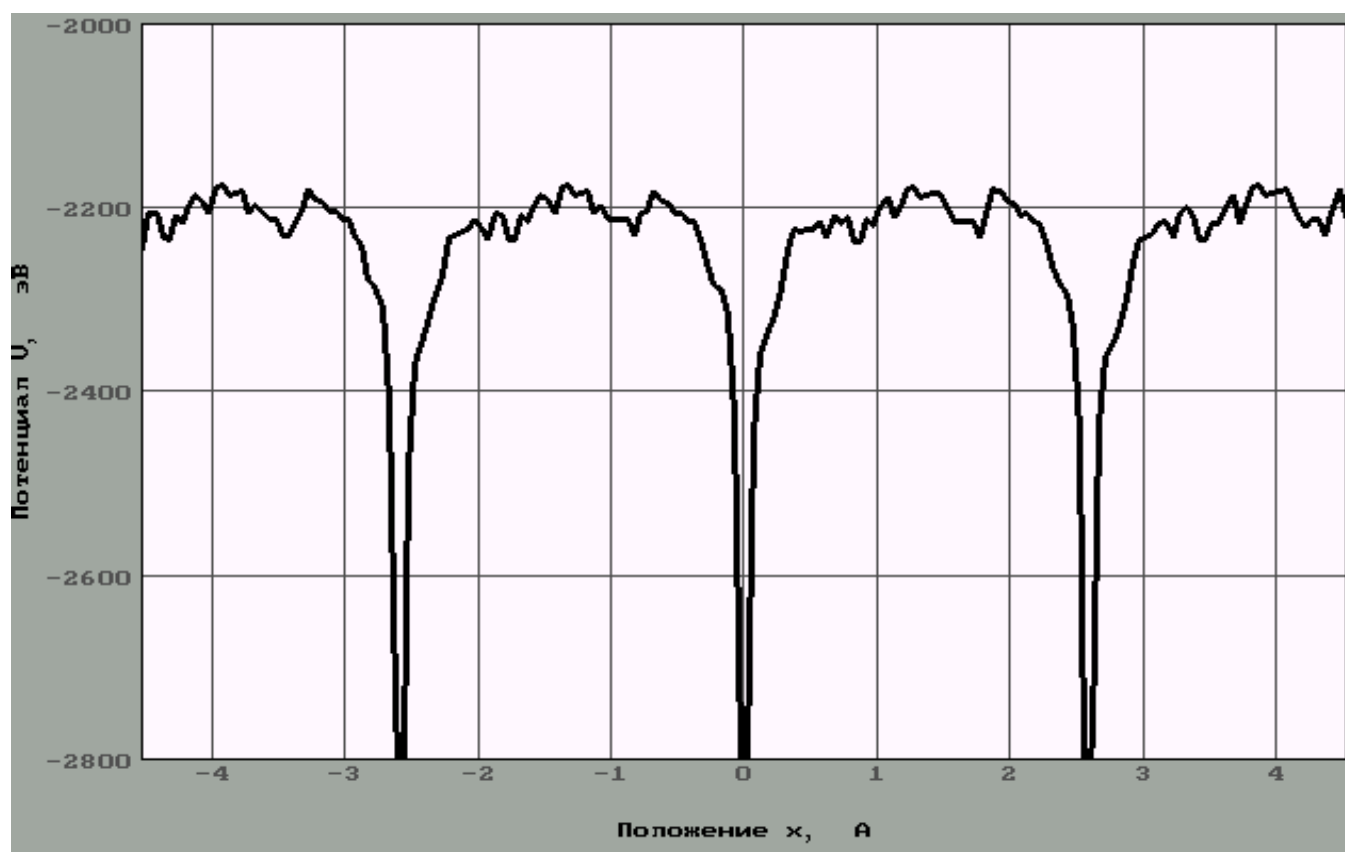


Рисунок 6 – Потенциальная кривая рядом с пятью молекулами льда по оси x .

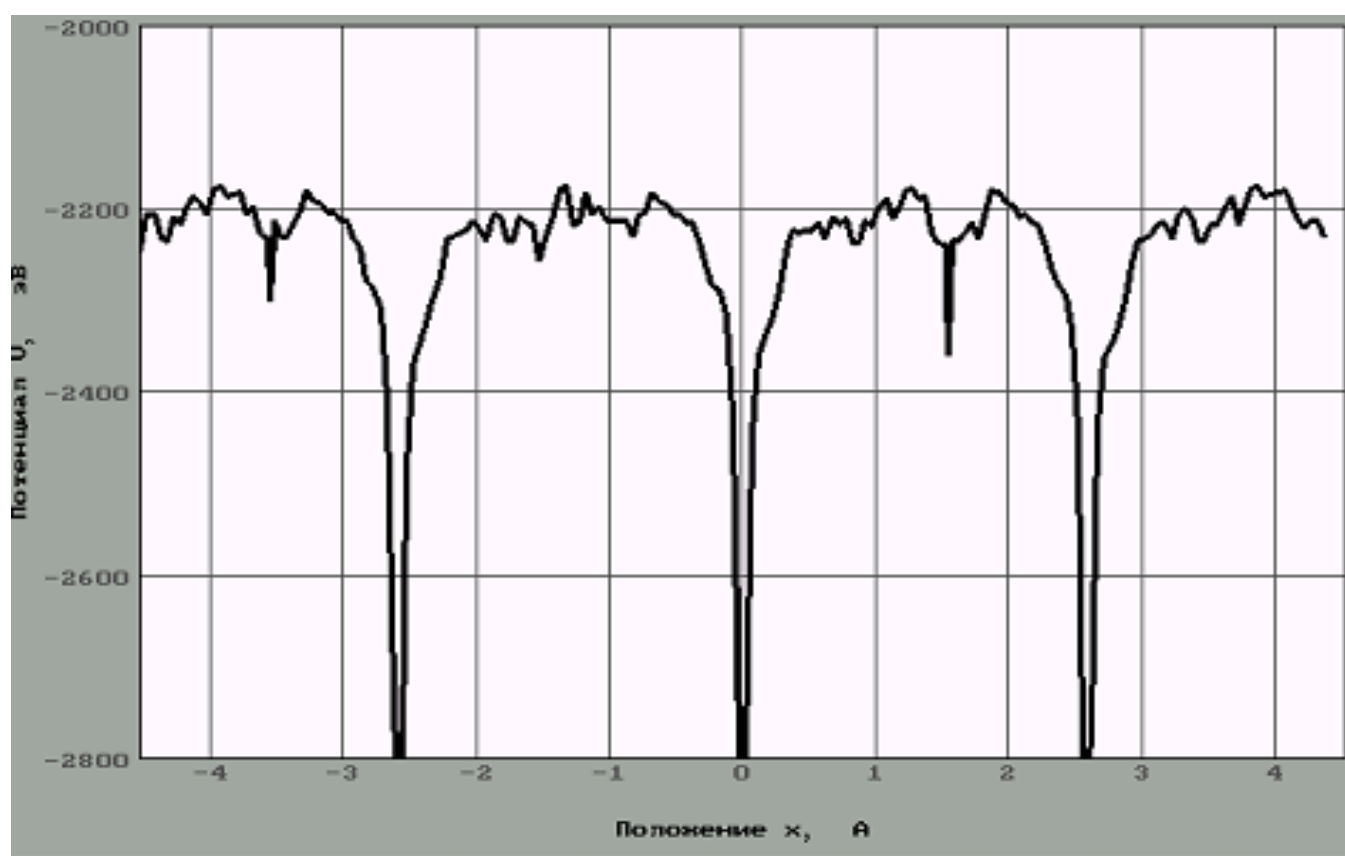


Рисунок 7 – Потенциальная кривая рядом с пятью молекулами воды по оси x .

ВЫВОДЫ

Изложенный в диссертации материал позволяет сформулировать следующие основные результаты:

1. Разработана расчётная схема численно-аналитического моделирования кристаллического потенциала, основанная на использовании аналитического решения уравнения Пуассона. Полученные результаты подтвердили обоснованность использования разработанной расчётной схемы.
2. Показано, что развитая в работе методика компьютерного моделирования кристаллического потенциала позволяет получить вид периодического потенциала для ГЦК структур и профиль кристаллического потенциала по любой траектории, что дает возможность при небольших затратах ресурсов ЭВМ получить объёмный портрет потенциала.
3. Получено аналитическое решение уравнения Шрёдингера для кристалла с ГЦК структурой. Найденные волновые функции для пяти первых энергетических состояний позволили теоретически описать структуру энергетических зон кристалла меди.
4. На примере неидеального кристалла меди, воды в твёрдой и жидкой фазах показано, что разработанная модель расчёта потенциала может быть использована для других твёрдотельных систем, включая, структуры с нарушенной симметрией и нарушенной периодичностью (кристаллы с примесями и дефектами), несимметричные и непериодические структуры (аморфные тела и жидкости).

Представленная методика упрощает расчёты энергетических зон, что позволяет определять свойства твёрдых тел посредством замены физических экспериментов компьютерным моделированием. Работа демонстрирует перспективность непосредственного моделирования физических объектов с применением ЭВМ.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Loucks T. Augmented plane wave method. – N.Y.: W.A. Bendjamin Inc., 1967. – 347 p.
2. Harsch P., von der Linden W., Lukas W.D. On the self-energy of electrons in metals // Solid State Commun. – 1987. – V. 62, № 5. – P. 359–363.
3. Спроул Р. Современная физика. – М.: Наука, 1974. – 591 с.
4. Ласуков В.В. Общая теория зонной структуры // ФТТ. – 1993. – Т. 35, № 3, – С. 711–720.
5. Slater J. Wave functions in the periodic potential field // Phys. Rev. – 1937. – V. 51. – P. 846.
6. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // УФН. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336–348.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Нурмаганбетов С.Б., Исакова К.А. Методика численного определения логарифмических производных для кристаллических структур // Физические процессы в твёрдых телах / Сб. науч. тр. – Караганда: КарГУ, 1994. – С. 78–81.
2. Исакова К.А. Разработка программных экспериментальных средств исследования зонных спектров твёрдых тел // Электронные и ионные процессы в диэлектриках / Сб. науч. тр. – Караганда: КарГУ, 1995. – С. 91–100.
3. Исакова К.А. Компьютерное моделирование потенциальной энергии кристаллических структур твёрдых тел // Тез. докл. 6-ой межд. конф. по радиационным гетерогенным процессам. – Кемерово, 1995. – С. 174.
4. Исакова К.А. Определение полной энергии металлических кристаллов // Тез. докл. 4-й науч. Казахстанской конф. по физике твёрдого тела. – Караганда, 1996. – С. 84.
5. Исакова К.А. Решения уравнения Шрёдингера относительно объединённой решётки / Труды проф.-преп. состава КарГТУ. – Караганда: КарГТУ, 1998. – С. 91–100.
6. Исакова К.А., Кукетаев Т.А. Аналитическое решение уравнения Шрёдингера для кристаллических структур // Вестник АН-МН РК. – 1998. – № 4. – С. 43–65.
7. Исакова К.А., Кукетаев Т.А. Остов-межостовная модель кристаллической решётки // Вестник АН-МН РК. – 1998. – № 6. – С. 98–103.
8. Исакова К.А. Анализ конечных неидеальных кристаллов // Матер. межд. науч.-практ. конф., Караганда: Санат, 2001. – Ч. 2. – С. 117–120.
9. Исакова К.А., Старостенков М.Д., Кукетаев Т.А. Компьютерное моделирование и расчёт структуры GaAs // Матер. межд. школы-семинара, Усть-Каменогорск, Барнаул: Алтайский госуниверситет, 2003. – С. 76–77.
10. Исакова К.А., Кукетаев Т.А. Компьютерное моделирование и расчёт ГЦК и ОЦК структуры // Вестник Евразийского университета. – 2003. – № 4.

Искакова Күлпаш Аманқызы

**РЕТТЕЛГЕН ЖҮЙЕЛЕРДЕГІ ЭЛЕКТРОНДАРДЫҢ
ЭНЕРГЕТИКАЛЫҚ ДЕҢГЕЙЛЕРІН АНЫҚТАУ ӘДІСІ**

01.04.07 – конденсияланған күй физикасы

Физика-математика ғылымдарының кандидаты ғылыми дәрежесін
алу үшін дайындалған диссертация

Компьютерлік моделдеу әдісімен жақтары центрленген кубтік құрылымдағы металдық кристалдар үшін электрондардың энергетикалық деңгейлері зерттелді. Бұл компьютерлік әдіс жақтары центрленген кубтік құрылыммен қатар басқа да реттелген жүйелер, мәселен, мұз үшін пайдаланылды.

Аналитикалық есептеулер арнаулы «Derive» бағдарламасы негізінде жүзеге асырылды. Кристалдық жүйелерді моделдеу үшін кешенді компьютерлік бағдарлама жасалынды.

Жұмыстың мақсаты реттелген кристалдық жүйелер үшін электрондық деңгейлердің энергетикалық спектрлерін дәл анықтайтын кристалдық потенциалмен толқындық функцияларды есептеуге негізделген.

Мақсатқа жету барысында компьютерлік моделдеу әдісімен мынандай мәселелер шешілді:

1. Жақтары центрленген кубтік құрылымдардың барлық ерекшеліктерін ескеретін кристалдық потенциалды анықтау.
2. Кристалдың толқындық функциясын анықтау үшін ионаралық кеңістік моделінің қажеттігін дәлелдеу.
3. Аналитикалық әдіспен алынған толқындық функциялар негізінде жақтары центрленген кубтік құрылым үшін электрондардың энергетикалық деңгейін есептеу.

Жұмыстың барысында келесі жағдайлар жетілдірілді: кристалл өзін құрайтын барлық элементтер жиынтығынан тұратын біріктірілген жүйе; олардың қасиеті еркін күй жағдайында емес, кристалл біртұтас жүйе күйінде анықталады. Кристалл құрылымы және оның өлшемі туралы байымдамалар сырттан енгізілмейді, кристалл элементтерінің өзара әсерлесуінде сызықсыз суперпозиция қолданылады. Эксперимент арқылы анықталатын кристалл қасиеттері, мысалы элементтердің периодты орналасуы алдын-ала постулат түрінде емес, жетілдірілген әдістің салдары болып табылады.

Диссертацияда баяндалған материалдар барысында мынандай негізгі тұжырымдық нәтежелер тағайындалды:

1. Кристалдық потенциалды есептеу үшін санды-аналитикалық моделдеу Пуассон теңдеуінің аналитикалық шешімін қолдану арқылы алынған. Алынған нәтежелер құрастырылған есептеулердің қолдануының дұрыстығын көрсетеді.
2. Жақтары центрленген кристалдық құрылым үшін компьютерлік модельдеу негізінде потенциалдың алдын-ала периодты екендігін

ескермей-ақ периодты алуға болатыны көрсетілді. Мыс кристаллының кластері үшін, потенциал жобасы кез-келген траектория бойынша және оның көлемдік суретін компьютерлік моделдеу арқылы жүзеге асырылған. Компьютермен модельдеудің тиімді жағы, сандық әдістерді қолданбай-ақ күрделі модельді құру мүмкіндігі бар, бұл жұмыста осы мүмкіндік қолданылған.

3. Тұңғыш рет жақтары центрленген құрылымдағы кристалдар үшін Шредингер теңдеуінің аналитикалық шешімі алынды. Мыс кристалы үшін алғашқы бес энергетикалық күйлерге сәйкес электрондардың энергетикалық деңгейлері мен толқындық функцияларына толық негіздеме берілді.
4. Ұсынылып отырған әдісті металдарға ғана емес басқа да қатты заттарды зерттеуге қолдануға болатынын мұз кристалы жүйесінің потенциалдық энергиясын анықтау арқылы көрсетілген. Мұз құрылымының торы энергетикалық минимумдау шарты бойынша анықталған. Жұмыста көрсетілген әдісті кез-келген периодты жүйеге ғана емес, кез-келген қатты денелер үшін, реттелмеген жүйелерге де яғни периодтілігі мен симметриясы бұзылған құрылымдар (қоспалар мен ақаулардан тұратын кристалдар), симметриясыз және периодсыз құрылымдар (аморфты заттар мен сұйықтар) үшін де қолдануға болады.

Ұсынылған әдіс энергетикалық деңгей есептерін жеңілдетеді, қатты денелердің қасиетін анықтауда физикалық зерттеулерді компьютерлік модельдеумен ауыстыруға мүмкіндік береді. ЭЕМ-сын қолдану арқылы физикалық объектілерді тікелей моделдеудің тиімділігі осы жұмыста көрсетілген.

Iskakova Kulpash Amanovna

**THE METHOD OF ELECTRONS ENERGY BANDS
IN THE ORDERLY SYSTEMS**

01.04.07 – condensed state physics

Dissertation is presented for the scientific degree
of candidate of physical and mathematical sciences

The energy levels for metallic crystals which have face centered cubic structures were investigated with methods of computer modeling. The worked out method was used not only for FCC structures but also in other ordered structures like ice.

The analytical calculations were carried out with the help of specialized program of analytical calculations «Derive», while synthesis and modeling of investigated objects of worked out model were realized on specially created program complex of crystalline structure modeling.

The aim of the work is development of method of precise crystalline potentials and wave functions which permit to calculate electron states energy spectra in different solids without adjustment and use of correction factors. The calculations results have been probed on copper crystals which in our case will be presented as model system.

For the achieving the mentioned aim the following problems were to be settled:

1. Using computer modeling technology to obtain crystalline potential shape considering all peculiarities of a crystal with face centered cubic structure.
2. To substantiate the model of inter ionic lattice for determining crystal wave function relatively to united lattice.
3. To carry out the calculations of energy levels for face centered structures on the base of wave functions obtained by analytical way; to compare the results with data of other authors.

In this work the following approach is developed: crystal is considered as common system of the constructed elements, whose properties are determined by crystal-system and absent out of the crystal in free state; nonlinear superposition of all elements interaction is used; no assumptions about crystal structure and its sizes are submitted out. Known crystal properties from experiment, for example, periodicity of elements arrangement, must be obtained as a consequence of developed approach but not postulated beforehand.

On the basis of stated material the following main results are formulated:

1. It was shown that the developed approach of computer modeling of crystalline potential for FCC structure permits to obtain the image of periodical potential without primary assumption about its periodicity.
2. It was shown on the example of copper FCC lattice that computer model permits to obtain profile of crystalline potential on any trajectory, i.e. with little PC resources expense it is possible to obtain volumetric potential image.
3. Analytical solution for Schroedinger equation for crystal with FCC structure is derived. Wave functions and energy levels for copper crystal for the first five

states are theoretically substantiated. Energy levels for the first states on the basis of derived wave functions of copper crystal are determined.

4. The proposed method can be used not only for metals but also for other solids. This is shown by determination of ice crystal potential energy. The ice structure is determined by energy minimization condition. On the example of nonideal copper crystal, water in solid and liquid phases it was shown that the method proposed in the thesis is useful not only for any periodical structures but also for nonperiodical systems. So, it permits to use this potential calculation model for any solids systems including structures with distorted symmetry and distorted periodicity (crystals with impurities and defects), nonsymmetrical and nonperiodical structures (amorphous bodies, liquids).

The proposed method simplifies the calculations of energy zones which permits to determine the solids properties by means of substitution of physical experiments to computer modeling. The work demonstrates availability of direct physical objects modeling with the use of PCs.

Искакова Кульпаш Амановна
МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ
ЭЛЕКТРОНОВ В УПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ
Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Оригинал-макет подготовлен на L^AT_EX 2 ϵ

Подписано к печати 18.02.2004 г. Формат 60×84^{1/16}.

Объем 1,0 усл. п. л. Тираж 100 экз. Заказ № 34

Гарнитура Таймс. Печать RISO. Бумага офсет.

Отпечатано с оригинал-макета в ТОО «М-Стиль»,
Республика Казахстан, 463000 Актобе, ул. Маресьева, 95,
т. (3132) 567482.

