

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

*Усова В. А., студент гр.378103, Мастеница А. А., студент гр. 378101*

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
г. Минск, Республика Беларусь*

*Смирнова Г.Ф. – канд. физ.-мат. наук*

**Аннотация.** В данной статье рассматриваются основные аспекты электронных состояний и электронной структуры твердых тел. Анализируется зонная структура, форма поверхности Ферми, различия между полупроводниками и металлами, квантовые эффекты в наноструктурах, а также магнитные свойства материалов.

**Ключевые слова.** *Зонная структура, поверхности Ферми, рентгеновская дифракция, спектроскопические методы, электронная микроскопия, спектроскопия в электроне.*

Квантовая механика является фундаментальной теорией, которая описывает поведение микрочастиц, таких как электроны, в микроскопическом масштабе. Она играет ключевую роль в описании электронных состояний, то есть разрешенных энергетических уровней и связанных с ними характеристик электрона в атомах, молекулах и других квантовых системах.

Основные принципы квантовой механики, которые имеют прямое отношение к описанию электронных состояний, включают следующее:

1. Дискретные энергетические уровни.

Квантовая механика утверждает, что энергия электрона в атоме или молекуле является дискретной и ограничена определенными значениями. Это означает, что электрон может находиться только на определенных энергетических уровнях, называемых квантовыми состояниями.

2. Волновая функция.

Квантовая механика описывает состояние электрона с помощью математической функции, называемой волновой функцией. Волновая функция содержит информацию о вероятности обнаружения электрона в определенном месте и времени, а также о его энергии и других физических свойствах.

3. Принцип суперпозиции.

Квантовая механика позволяет электрону находиться в суперпозиции нескольких состояний одновременно. Это означает, что электрон может существовать во всех возможных состояниях с разными энергиями одновременно, но при измерении будет обнаружен только в одном из них.

4. Квантовые переходы.

Квантовая механика описывает переходы электрона между различными квантовыми состояниями. Эти переходы могут сопровождаться поглощением или излучением энергии в виде фотонов, что объясняет явления поглощения и испускания света атомами и молекулами.

5. Принцип неопределенности.

Квантовая механика утверждает, что существует фундаментальное ограничение точности, с которой можно одновременно измерить определенные пары физических величин, таких как положение и импульс электрона. Этот принцип неопределенности Вернера Гейзенберга имеет важное значение для понимания поведения электронов в микроскопическом мире.

Квантовая механика позволяет объяснить множество явлений, связанных с электронами в атомах и молекулах, и является основой для многих областей физики и химии, включая квантовую химию и квантовую электронику. Без применения квантовой механики было бы невозможно полноценно описать и понять электронные состояния и их взаимодействие в микромире. Квантовая механика является фундаментальным инструментом для развития современных технологий, таких как квантовые компьютеры, квантовая криптография и квантовая передача информации.

Модель свободных электронов и зонная структура - это концепции, используемые в теории твердого тела для объяснения электрических свойств материалов.

### **Модель свободных электронов и зонная структура**

Модель свободных электронов представляет собой упрощенную модель, в которой предполагается, что свободные электроны в твердом теле не связаны с определенными атомами, а могут свободно перемещаться по всему материалу. Эта модель хорошо описывает поведение металлов, в которых электроны в валентной зоне могут свободно двигаться под воздействием внешнего электрического поля.

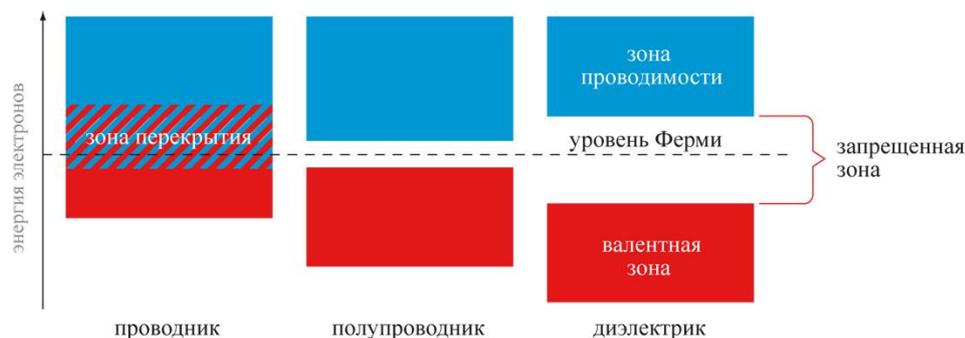


Рисунок 1 – Зонная теория

Однако для объяснения свойств полупроводников и изоляторов необходимо учитывать зонную структуру.

Зонная структура описывает распределение энергии электронов в твердом теле по различным энергетическим уровням, называемым энергетическими зонами. Зоны могут быть заполнены электронами или быть пустыми в зависимости от энергии электронов. Самые нижние заполненные зоны называются валентными зонами, а наиболее высокие незаполненные зоны - зонами проводимости.

В полупроводниках, зоны проводимости и валентные зоны перекрываются, и электроны могут перемещаться из валентных зон в зоны проводимости при подаче энергии, например, при повышении температуры или приложении электрического поля. В изоляторах зона проводимости широко разделена от валентных зон, и электроны не могут легко переходить из одной зоны в другую.

Исследование зонной структуры и модели свободных электронов позволяет понять электрические, оптические и магнитные свойства материалов и является основой для разработки новых технологий в области полупроводниковых устройств и электроники.

#### **Фермиевские поверхности**

Фермиевские поверхности - это важное понятие в физике твердого тела, которое используется для описания электронной структуры кристаллических материалов. Фермиевская поверхность представляет собой границу в пространстве импульсов между заполненными и незаполненными энергетическими уровнями электронов.

В теории полупроводников и металлов Фермиевская поверхность играет важную роль в определении электронных и транспортных свойств материала. Она определяет доступные энергетические состояния для электронов в кристаллической решетке и связана с характеристиками проводимости и подвижности электронов.

Фермиевская поверхность образуется путем построения поверхности в пространстве импульсов, где энергия электронов соответствует энергии Ферми[3]. Энергия Ферми - это энергия самого высоко заполненного электронного уровня при абсолютном нуле температуры. Фермиевская поверхность разделяет пространство импульсов на запрещенные и разрешенные зоны, определяя, какие энергетические состояния могут быть заняты электронами.

Форма и топология Фермиевской поверхности зависят от геометрии кристаллической решетки и химического состава материала. Она может быть представлена в виде закрытых поверхностей, открытых поверхностей или сложных трехмерных структур. Форма Фермиевской поверхности влияет на электронные свойства материала, такие как проводимость, магнитные свойства и возможность появления различных фазовых переходов.

Исследование Фермиевских поверхностей является важным для понимания и проектирования новых материалов с определенными электронными свойствами. Это позволяет предсказывать и объяснять поведение электронов в материалах и оптимизировать их свойства для конкретных приложений, таких как полупроводники, металлы, катализаторы и многие другие.

#### **Экспериментальные методы изучения электронных состояний**

Рентгеновская дифракция является экспериментальным методом, который используется для изучения структуры кристаллических материалов и определения их электронных состояний. Этот метод основан на явлении дифракции рентгеновских волн на решетках кристаллов.



Рисунок 2 – Порошковый рентгеновский дифрактометр во время работы

В эксперименте рентгеновский луч направляется на кристалл, и происходит рассеяние луча от атомов внутри кристаллической решетки. Рассеянные лучи образуют интерференционную картину, которая записывается на детекторе. Анализ этой интерференционной картинки позволяет определить положение и интенсивность отраженных лучей, что дает информацию о распределении электронной плотности в кристалле.

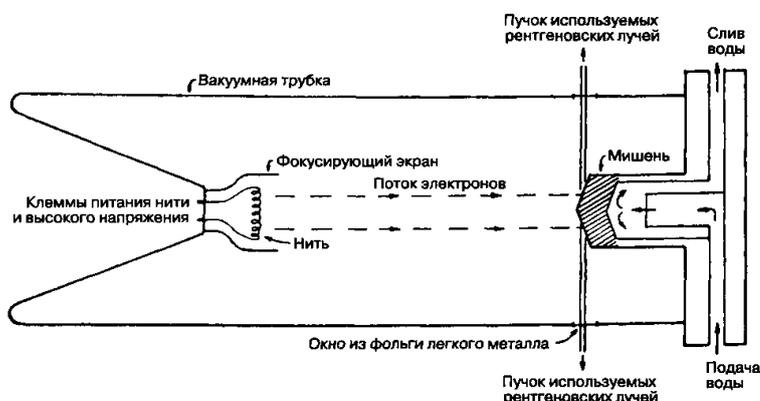


Рисунок 3 – Дифракция рентгеновских лучей кристаллами

Рентгеновская дифракция широко применяется в исследованиях электронных состояний в кристаллах, так как позволяет определить их кристаллическую структуру, расстояния между атомами в кристалле, а также ориентацию кристаллических плоскостей. Это важная информация для понимания электронных свойств и поведения материалов.

Спектроскопические методы изучения электронных состояний включают широкий спектр техник, которые позволяют анализировать взаимодействие электромагнитного излучения с материалами на основе их энергетических уровней.

Одним из таких методов является фотоэмиссионная спектроскопия, которая измеряет энергетический спектр электронов, испускаемых материалом при освещении его определенной энергией фотонов. Этот метод позволяет исследовать электронные уровни материала, его структуру поверхности и поверхностные состояния.

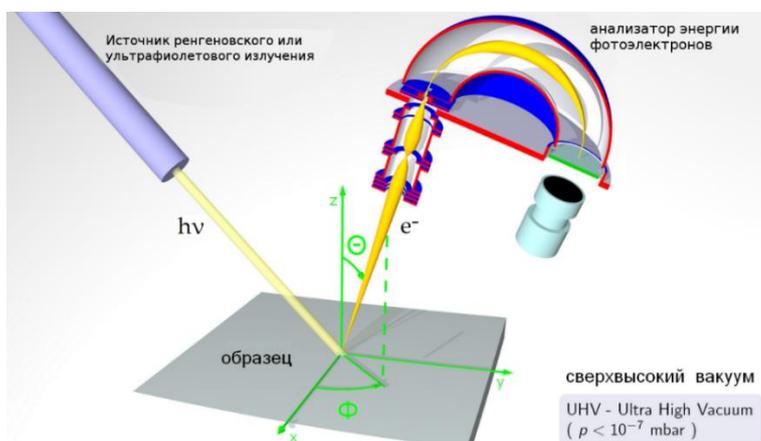


Рисунок 4 – Общий принцип фотоэлектронной спектроскопии

Еще одним спектроскопическим методом является рентгеновская фотоэмиссионная спектроскопия (XPS). В XPS анализируется энергетический спектр электронов, испускаемых материалом под действием рентгеновского излучения. Этот метод позволяет исследовать электронную структуру поверхностных слоев материала, определить состав и химическое состояние атомов на поверхности.

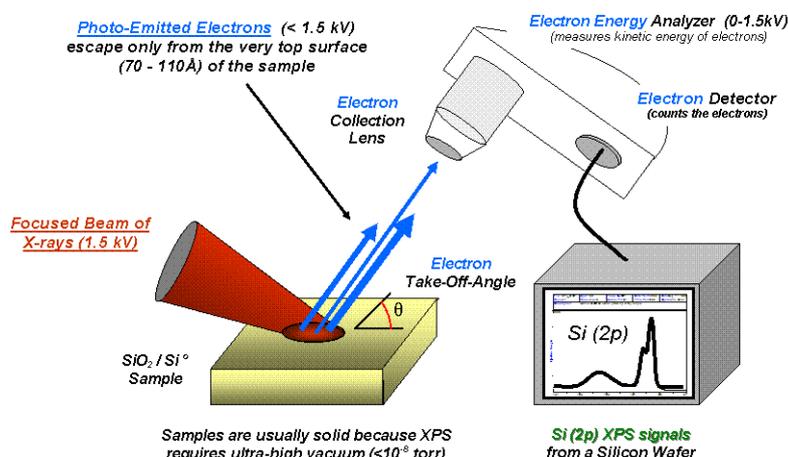


Рисунок 5 – Схема монохроматической системы рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Спектроскопические методы также включают магнитно-оптические методы, такие как электронный парамагнитный резонанс (EPR) и ядерный магнитный резонанс (NMR), которые позволяют исследовать магнитные и ядерные свойства материалов и получить информацию о взаимодействии электронов и ядер.

Электронная микроскопия и спектроскопия в электроне представляют собой методы изучения электронных состояний на микроскопическом уровне.

Электронная микроскопия (ЭМ) использует пучок электронов вместо света для получения изображений образцов с очень высоким разрешением. Существуют различные типы электронных микроскопов, такие как сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) и трансмиссионный электронный микроскоп (ТЭМ). В СЭМ пучок электронов сканирует поверхность образца, а рассеянные электроны собираются для формирования изображения. В ТЭМ пучок электронов проходит через тонкий образец, и рассеянные электроны используются для формирования изображения. Эти методы позволяют наблюдать структуру материала на микро- и наномасштабах.



Рисунок 6 – Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) и трансмиссионный электронный микроскоп (ТЭМ)

Электронная спектроскопия в электроне (EELS) является методом, который позволяет получать информацию о свойствах электронов в образце. В EELS энергетический спектр электронов, рассеянных образцом, анализируется с помощью энергетического анализатора. Этот метод позволяет определить энергетические уровни электронов, их потерю энергии и другие характеристики. EELS часто используется для исследования электронных состояний в наноструктурах, полупроводниках, катализаторах и других материалах.

Комбинирование электронной микроскопии и спектроскопии в электроне позволяет получать не только изображения структуры образца, но и информацию о его химическом составе, электронных свойствах и магнитных характеристиках. Эти методы широко применяются в различных областях науки и технологий, включая материаловедение, нанотехнологии, биологию и другие.

**Список использованных источников:**

1. А.Ф. Ревинский *Основы теории твердого тела*. – Режим доступа: *Пособие для студентов, 2009.* – с. 53-54.
2. *Открывая двери в мир квантовой физики: история и вклад создателей*. – Режим доступа: <https://nauchnietati.ru/spravka/sozdateli-kvantovoj-fiziki/> [Электронный ресурс].
3. *Электронные фазы твёрдых тел*. – Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/elektronnye-fazy-tverdyh-tel/viewer> [Электронный ресурс].
4. *Электронная структура твердых тел и её исследование на многокристалльных рентгеновских спектрометрах*. – Режим доступа: <https://www.dissercat.com/content/elektronnaya-struktura-tverdykh-tel-i-ee-issledovanie-na-mnogokristalnykh-rentgenovskikh-spe> [Электронный ресурс].
5. *Эфиродинамические основы электромагнетизма*. – Режим доступа: <http://vnu-library.ru/atsukovsky/elektromagnetizm/elektromagnetizm.htm> [Электронный ресурс].

## ELECTRONIC STATES AND ELECTRONIC STRUCTURE OF SOLIDS

*Usova V. A., Mastenitsa A. A.*

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics<sup>1</sup>, Minsk, Republic of Belarus*

*Smirnova G.F. – PhD in Physics and Mathematics*

**Annotation.** This article deals with the main aspects of electronic states and electronic structure of solids. The zone structure, the shape of the Fermi surface, the differences between semiconductors and metals, quantum effects in nanostructures, and the magnetic properties of materials are analyzed.

**Keywords.** Zone structure, Fermi surfaces, X-ray diffraction, spectroscopic methods, electron microscopy, electron spectroscopy.