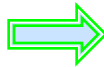


III. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

3.1. Модельные представления потенциала на поверхности

Успехи в теоретическом описании
объемных свойств твердых тел

Взаимодействие электронов
аппроксимируется эффективным
потенциалом,
вообще говоря *нелокальным*.



- Трехмерная трансляционная симметрия.
- Одноэлектронное приближение
- Одноэлектронное приближение

Величина потенциала зависит не только от
координаты данного электрона, но и от
расположения других электронов

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_i) = \prod_{i=1}^N \psi(r_i)$$

Собственные значения энергии определяют систему уровней, на которых могут находиться электроны.

Полубесконечный кристалл обладает только двумерной трансляционной инвариантностью

Полубесконечный кристалл обладает только двумерной трансляционной инвариантностью

Использование традиционных подходов возможно только при использовании приближенного описания системы

Методы различаются.



- Выбором эффективного потенциала
- Граничными условиями
- Представлением волновых функций

Даже в случае металлов выбор - нелегкое дело

Модель полубесконечного кристалла

Решение в трех областях: объем, поверхностная область, вакуум
Волновые функции сшиваются на границе между областями

Количество плоскостей выбирается так, чтобы в середине пленки воспроизводились объемные свойства

Модель пленки

Решение для ограниченного набора атомных плоскостей, симметричного относительно **начала** координат.

Количество плоскостей выбирается так, чтобы в середине пленки воспроизводились объемные свойства

“Искусственный” кристалл

Система, состоящая из периодически расположенных пленок.

Расстояние между ними выбирается таким, чтобы можно было пренебречь их взаимодействием..

Такая геометрия позволяет использовать циклические граничные условия

Важен выбор эффективного потенциала

Важен выбор эффективного потенциала

Первый вариант

Пренебрегается
электрон-электронным
взаимодействием



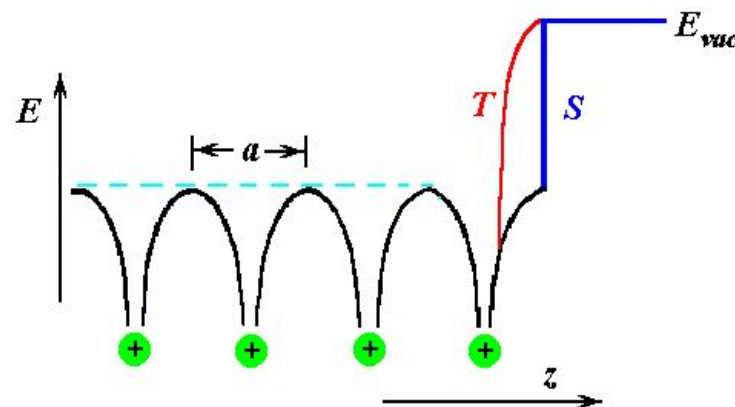
Энергия взаимодействия
электронов с ионами существенно
больше

Приближение сильной связи

Ход потенциала на поверхности?.

Две возможности

1. Как и в объеме вплоть до $z=0$, где скачок к значению потенциала в вакууме E_v
2. Потенциал в наружном слое плавно достигает значения, соответствующего U_v



Упускаются детали структуры твердого тела

Другое приближение
(диаметрально противоположное)

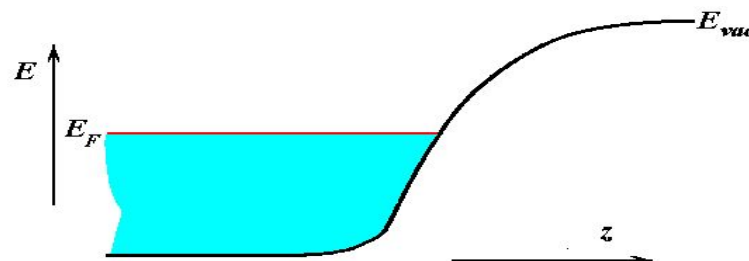
Пренебрегается электрон-ионным
взаимодействием по сравнению
с электрон-электронным



В первом приближении можно
не учитывать периодического
изменения потенциала в объеме

Упускаются детали структуры твердого тела

Единственный параметр, характеризующий
свойства кристалла →
концентрация электронного газа $\rho(\mathbf{r})$.



Электроны считаются свободными, не связанными с ионными остовами.

Радиус сферы Вигнера-Зейтца r_s



Радиус сферы, объем которой
равен объему, занимаемому
в среднем одним электроном

$$\frac{4}{3}\pi r_s^3 = \frac{1}{\rho}$$

Металлы

Металлы



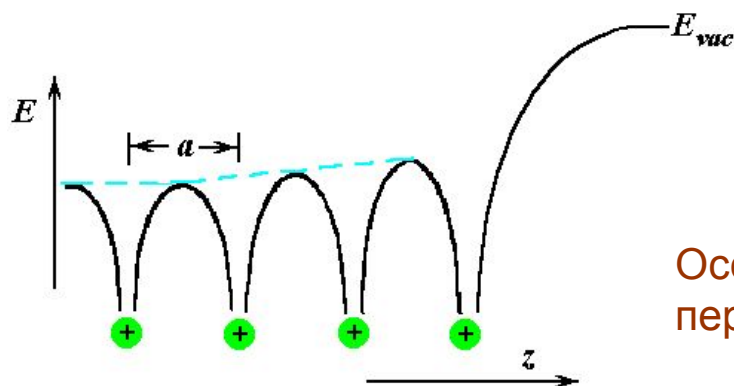
r_s - от 1.5 ат.ед. (тугоплавкие металлы - W, Mo, Ta) до 5 ат.ед. у Cs

Приближение желе-металла

Можно объединить оба подхода

Приближение самосогласованной решетки

Позволяет учесть взаимодействие как между электронами, так и между электронами и ионами



Особенно большие трудности в случае переходных металлов

Имеют незаполненную d -оболочку

d -электроны целиком или частично могут быть локализованы на связях между атомами.

Возможно другое, диаметрально
противоположное приближение

Возможно другое, диаметрально
противоположное приближение



Кластерное

Поверхность заменяется группой из нескольких атомов (кластером).

Влияние остальных частиц твердого тела рассматривается
как возмущение.

Позволяет использовать для расчетов методы квантовой химии