

А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс

**Динамическая теория
кристаллической решетки в
гармоническом приближении**

**Москва
«Книга по Требованию»**

УДК 53
ББК 22.3
А11

А11 **А. Марадудин**
Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении / А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс – М.: Книга по Требованию, 2013. – 382 с.

ISBN 978-5-458-41343-5

Предлагаемая вниманию читателей книга, написанная тремя крупными американскими специалистами в области теоретической физики твердого тела, содержит систематическое изложение современного состояния и достижений теории кристаллической решетки, знакомство с которыми необходимо любому специалисту в области кристаллофизики, физики полупроводников и диэлектриков, металлов и сплавов, магнитных материалов и т.п. В книге рассмотрены определение и свойства спектра упругих колебаний решетки, способы вычисления термодинамических функций, роль различных дефектов и способы их учета, роль поверхности и поверхностных колебаний и, наконец, методы определения энергетического спектра по данным о рассеянии рентгеновских лучей и нейтронов. Книга рассчитана на научных работников, как теоретиков, так и экспериментаторов, занимающихся различными вопросами физики твердого тела, а также будет полезна преподавателям и аспирантам физических и физико-технических факультетов.

ISBN 978-5-458-41343-5

© Издание на русском языке, оформление
«YOYO Media», 2013

© Издание на русском языке, оцифровка,
«Книга по Требованию», 2013

Эта книга является репринтом оригинала, который мы создали специально для Вас, используя запатентованные технологии производства репринтных книг и печати по требованию.

Сначала мы отсканировали каждую страницу оригинала этой редкой книги на профессиональном оборудовании. Затем с помощью специально разработанных программ мы произвели очистку изображения от пятен, клякс, перегибов и попытались отбелить и выровнять каждую страницу книги. К сожалению, некоторые страницы нельзя вернуть в изначальное состояние, и если их было трудно читать в оригинале, то даже при цифровой реставрации их невозможно улучшить.

Разумеется, автоматизированная программная обработка репринтных книг – не самое лучшее решение для восстановления текста в его первоизданном виде, однако, наша цель – вернуть читателю точную копию книги, которой может быть несколько веков.

Поэтому мы предупреждаем о возможных погрешностях восстановленного репринтного издания. В издании могут отсутствовать одна или несколько страниц текста, могут встретиться невыводимые пятна и кляксы, надписи на полях или подчеркивания в тексте, нечитаемые фрагменты текста или загибы страниц. Покупать или не покупать подобные издания – решать Вам, мы же делаем все возможное, чтобы редкие и ценные книги, еще недавно утраченные и несправедливо забытые, вновь стали доступными для всех читателей.



Серия Книжный Ренессанс

www.samizday.ru/reprint

мы сделали это в виде приводимого ниже дополнительного списка литературы. Работы [1—17] этого списка относятся к развитию квантовомеханической теории динамики идеального кристалла. Далее следуют работы [18—30], связанные с разработкой теории колебаний кристаллов, содержащих дефекты, и, наконец, работы [31—51] посвящены задачам рассеяния медленных нейтронов и дифракции рентгеновских лучей. Этот дополнительный список, разумеется, не претендует на полноту, но он поможет читателю в какой-то мере оценить роль советских ученых в развитии теории колебаний кристаллов.

Мы надеемся, что книга будет полезна как теоретикам, так и экспериментаторам, работающим в различных областях физики твердого тела.

Перевод книги выполнен Е. Д. Трифоновым (предисловие, гл. I, III, IV, VIII) и И. В. Абаренковым (гл. II, V, VI).

М. И. Петрашень

ЛИТЕРАТУРА

1. Демиденко З. А., Кучер Т. И., Толпыго К. Б., Собственные частоты колебаний решетки германия, рассчитанные в различных приближениях, ФТТ, 3, 2482 (1961).
2. Демиденко З. А., Демиденко А. А., Толпыго К. Б., Собственные частоты, амплитуды и теплоемкости КВг, Укр. физ. журн., 3, 728 (1958).
3. Демиденко З. А., Кучер Т. И., Толпыго К. Б., Частоты и амплитуды колебаний атомов кристалла типа алмаза для волнового вектора, направленного по диагонали грани куба, ФТТ, 4, 104 (1962).
4. Демиденко З. А., Толпыго К. Б., Нормальные колебания щелочно-галогидных кристаллов с нонами, существенно отличающимися по размерам, ФТТ, 3, 3435 (1961).
5. Король Э. Н., Толпыго К. Б., Динамика кристаллических решеток типа ZnS с дробными переменными зарядами ионов, ФТТ, 5, 2193 (1963).
6. Кучер Т. И., Собственные частоты колебаний кремния и алмаза, ФТТ, 4, 992 (1962).
7. Кучер Т. И., Собственные частоты и амплитуды нормальных колебаний кристалла KCl ЖЭТФ, 32, 498 (1957).
8. Либерберг - Кучер Т. И., Энергия взаимодействия точечных зарядов в ионном кристалле, ЖЭТФ, 30, 724 (1956).
9. Либерберг Т. И., Толпыго К. Б., Многоэлектронное рассмотрение движения электрона (дырки) в возмущенном кристалле, ЖЭТФ, 26, 35 (1954); 31, 1002 (1956).

10. Машкевич В. С., Электрические, оптические и упругие свойства кристаллов типа алмаза, ЖЭТФ, 32, 866 (1957); 36, 108 (1959); 36, 1736 (1959).
11. Толпыго К. Б., Микроскопическая теория электронных состояний в полярных кристаллах, Укр. физ. журнал, 2, 242 (1957).
12. Толпыго К. Б., Силы взаимодействия между ионами и уравнения колебаний ионных решеток, найденные на основе многоэлектронного рассмотрения состояний ионов и адиабатического приближения, Укр. физ. журнал, 4, 72 (1959).
13. Толпыго К. Б., Дальнедействующие силы и уравнения динамики гомеополлярных кристаллов типа алмаза, ФТТ, 3, 943 (1961).
14. Толпыго К. Б., Заславская И. Г., Спектр собственных колебаний NaCl с учетом деформации ионов, Укр. физ. журнал, 1, 266 (1956).
15. Толпыго К. Б., Применение теории колебаний решеток с деформируемыми ионами к рассмотрению физических свойств бинарных кубических кристаллов, ФТТ, 1, сборн. 1, 219 (1959).
16. Толпыго К. Б., Оптические, упругие и пьезоэлектрические свойства ионных и валентных кристаллов с решеткой типа ZnS, ФТТ, 2, 2655 (1961).
17. Толпыго К. Б., Состояние теории поляризации идеальных ионных и валентных кристаллов, УФН, 74, 269 (1961).
18. Завт Г. С., Кристофель Н. Н. Локальные колебания в ионных кристаллах с изотопическим дефектом, Труды ИФА АН ЭССР, 23, 3 (1963).
19. Завт Г. С., Об искажении дефектами зонных колебаний кристалла, ФТТ, 5, 1946 (1963).
20. Завт Г. С., К теории колебательных спектров U -центров, ФТТ, 5, 1086 (1963).
21. Завт Г. С., О влиянии дипольного взаимодействия на локальные колебания в ионных кристаллах, Труды ИФА АН ЭССР, 23, 218 (1963).
22. Завт Г. С., Дебаевское приближение в теории колебаний решетки с дефектом, псевдолокальные колебания, Труды ИФА АН ЭССР, 27, 69 (1964).
23. Завт Г. С., Тюрксен Э. Э., Искажение дефектами зонных колебаний в двухатомной цепочке, ФТТ, 6, 3201 (1964).
24. Завт Г. С., Условия возникновения и пространственное затухание локальных колебаний в двухатомной кубической решетке с примесью, Труды ИФА АН ЭССР, 29, 107 (1964).
25. Иосилевский Я., Каган Ю., Примесной атом в решетке с оптическими ветвями колебаний, ЖЭТФ, 46, 2165 (1964).
26. Ройцын А. Б., Колебания неидеальной решетки и спин-решеточная релаксация, ФТТ, 3, 2879 (1961).
27. Кристофель Н. Н., Теория колебаний кристаллической решетки, Труды ИФА АН ЭССР, 29, 3 (1964).
28. Кристофель Н. Н., Ребане К. К., Трифонов Е. Д., Хижияков В. В., Динамика решетки с примесями и квазилокальные электронно-колебательные спектры кристаллов, Изв. АН ЭССР, сер. физ.-мат. наук, 13, 87 (1964).

29. Кристофель Н. Н., К теории колебаний решетки с дефектом, ФТТ, 4, 52 (1962).
30. Лифшиц И. М., Оптическое поведение неидеальных кристаллических решеток в инфракрасной области, ЖЭТФ, 12, 117 (1942).
31. Дзюб И. П., Резонансное рассеяние фононов примесными атомами и однофононное когерентное рассеяние медленных нейтронов, ФТТ, 6, 3691 (1964).
32. Дзюб И. П., Неупругое некогерентное рассеяние медленных нейтронов неупорядоченными твердыми растворами, ФТТ, 6, 1866 (1964).
33. Кривоглаз М. А., Шелдерман П. И., Корреляционная функция фонона и неупругое когерентное рассеяние нейтронов кристаллами, содержащими неглубокие электронные примесные центры, ФТТ, 6, 3272 (1964).
34. Кривоглаз М. А., Теория неупругого рассеяния нейтронов неидеальными кристаллами, ЖЭТФ, 40, 567 (1961).
35. Кривоглаз М. А., Влияние электронов проводимости на рассеяние нейтронов кристаллами, ФТТ, 3, 2761 (1961).
36. Кащеев В. Н., Кривоглаз М. А., Теория неупругого рассеяния нейтронов на примесных центрах в кристаллах, ФТТ, 3, 3167 (1961).
37. Кривоглаз М. А., Теория диффузного рассеяния рентгеновых лучей, нейтронов и электронов ионными кристаллами, содержащими заряженные дефекты или примеси, ФТТ, 3, 3682 (1961).
38. Каган Ю., Об определении функции распределения частот фононного спектра кристаллов, ЖЭТФ, 40, 312 (1961).
39. Каган Ю., Неупругое рассеяние медленных нейтронов на произвольных кристаллах и общая задача восстановления фононного спектра, ЖЭТФ, 42, 1375 (1962).
40. Каган Ю., Шернов А. П., О природе «хвоста» в сечении неупругого некогерентного рассеяния медленных нейтронов в кристаллах, ЖЭТФ, 47, 1997, 1964.
41. Казарновский М. В., Степанов А. В., О наблюдаемых вероятностях упругого рассеяния нейтронов и эффекта Мессбауэра, ЖЭТФ, 43, 2299 (1962).
42. Казарновский М. В., Степанов А. В., Об упругом рассеянии нейтронов и эффекте Мессбауэра при наличии локальных степеней свободы, ЖЭТФ, 47, 139 (1964).
43. Привороцкий И. А., К теории рассеяния нейтронов в неупорядоченных кристаллах, ЖЭТФ, 47, 1544 (1964).
44. Котари Л. С., Приближенное определение частотного спектра фононов в кристаллах при помощи рассеянных нейтронов, ЖЭТФ, 47, 2116 (1964).
45. Лайхтман Б. Д., К определению фононного спектра по сечению некогерентного рассеяния нейтронов на кристалле, ФТТ, 5, 3036 (1963).
46. Мицкевич В. В., Динамическая теория ионных кристаллов типа NaCl. Тепловые и упругие свойства, ФТТ, 3, 3022 (1961).

47. Оскотский В. С., Об исключении когерентного рассеяния из сечения рассеяния медленных нейтронов простыми кристаллическими решетками ЖЭТФ, 44, 657 (1963).
48. Потапов Л. П., О соотношении между теплоемкостью и тепловым фактором рассеяния рентгеновских лучей, ФТТ, 5, 1927 (1963).
49. Семеновская С. В. и Уманский Я. С., К вопросу о вкладе многофононных процессов в интенсивность диффузного рассеяния рентгеновских лучей кристаллической решеткой, ФТТ, 6, 2963 (1963).
50. Смирнов А. А., Тихонова Е. А., К теории рассеяния рентгеновых лучей упорядочивающимися сплавами с искаженной кристаллической решеткой, ФТТ, 3, 1238 (1961).
51. Филнпович В. Н., Теория рассеяния рентгеновских лучей на искаженных поликристаллах, ФТТ, 3, 1694, 1702, 1920 (1961).

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Нам было очень приятно узнать, что наша книга переведена на русский язык. Мы надеемся, что ее появление перед новой аудиторией послужит дальнейшему увеличению интереса к динамике решетки, а это будет лишь способствовать более глубокому пониманию динамических свойств кристаллов.

За два года, прошедших после завершения работы над рукописью американского издания книги, заметно возросла интенсивность как теоретических, так и экспериментальных исследований почти во всех областях динамики решетки, обсуждаемых в книге. Составляя список изменений и дополнений к русскому изданию, мы пытались включить в него ссылки хотя бы на наиболее важные последние работы по динамике решетки. Кроме того, мы устранили некоторые неточности изложения, допущенные в американском издании нашей книги, исправили ряд опечаток и опечаток в тексте. Надеемся, что эти дополнения и изменения повысят ценность книги.

Мы весьма признательны д-ру А. А. Гусеву за предоставленную нам возможность внесения поправок в настоящее издание нашей книги.

Март 1965 г.

*А. Марадудин
Э. Монролл
Дж. Вейсс*

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ

В наши дни бурного развития физики активный интерес к отдельной области исследования обычно сохраняется лишь в течение нескольких лет. Поэтому примечательно, что до сих пор делаются новые открытия и пишутся статьи в таком старом разделе физики, как теория колебаний решетки, — разделе, с которого началась современная физика твердого тела. Изданием настоящего обзора мы хотели бы отметить ее юбилей, пятидесятилетнюю годовщину выхода в свет основных работ Дебая [1] (1912) и Борна и Кармана [2] (1912).

Пятьдесят лет назад, двадцать лет назад и даже десять лет назад единственной целью исследования колебаний атомов в кристаллической решетке было объяснение макроскопических свойств кристаллов. Только в последние годы экспериментальная техника стала настолько могущественной, что мы можем теперь как бы находиться среди колеблющихся атомов и наблюдать в деталях их движение. В этом отношении очень плодотворным оказалось усовершенствование рентгеновской техники и создание аппаратуры для исследования рассеяния медленных нейтронов. По-видимому, эффект Мессбауэра также окажется ценным средством исследования колебаний решетки.

Мы начнем наш обзор с рассмотрения уравнений движения кристаллических решеток и обсуждения их связи с упругими свойствами кристаллов. Затем исследуем спектр собственных частот совершенного кристалла, а также его роль в определении термодинамических свойств кристаллов. Далее рассмотрим влияние на спектр кристаллических примесей и нарушений. Локальные колебания являются одним из следствий наличия

этих дефектов. Наше рассмотрение мы завершим исследованием корреляций движения пары атомов, как мгновенной, так и временной. Рассеяние колебаниями решетки рентгеновских лучей и нейтронов непосредственно связано с этими корреляциями.

Разделы физики фононов, получившие в последнее время наибольшее развитие, содержат исследование взаимодействия фононов с другими подсистемами кристалла, например с электронами, как в нормальных металлах, так и в сверхпроводниках, со спиновыми волнами в магнетиках и т. д. Хотя в нашей книге не рассматриваются ни упомянутые взаимодействия, ни обусловленные ангармонизмом взаимодействия фононов друг с другом, мы надеемся, что некоторые из наших результатов могут быть применены к этим проблемам. Если принять во внимание возможность такого расширения поля исследования, то можно ожидать, что старая проблема колебаний решетки останется областью плодотворного исследования и в будущем.

Мы хотели бы выразить признательность д-рам Флинну, Поттсу, Розенштоку и Уоллису за полезные обсуждения различных вопросов, рассмотренных в этой книге.

Январь 1963 г.

*А. А. Марадудин
Э. Б. Монтролл
Дж. Х. Вейсс*

ГЛАВА I

ВВЕДЕНИЕ

При любой температуре атомы в кристалле совершают малые колебания около своих положений равновесия; при абсолютном нуле — в результате нулевых колебаний, при конечной температуре — вследствие тепловых флуктуаций. Если потенциальную энергию кристалла разложить в ряд по степеням амплитуд этих малых колебаний и пренебречь всеми членами, следующими за квадратичными, то мы получим потенциальную энергию в так называемом гармоническом приближении. Это приближение и лежит в основе настоящей работы.

Многие авторы исследовали влияние колебаний решетки на термодинамические свойства кристаллов (особенно на теплоемкость) и связь между макроскопическими упругими свойствами кристалла и атомными силовыми постоянными, которые вместе с массами атомов, образующих решетку, определяют колебания при данной температуре. Результаты этих исследований были изложены в книге Борна и Куна [3] и в обзорных статьях Делоне [4], Блекмана [5] и Лейбфрида [6].

Все упомянутые выше работы характеризуются тем, что в них исследуется влияние колебаний атомов на свойства кристалла *как целого*. В противоположность этому настоящий обзор в основном посвящен рассмотрению влияния колебаний решетки на поведение отдельных атомов в кристалле и исследованию тех явлений, которые обусловлены локальным движением атомов. В то же время мы не можем избежать обсуждения некоторых свойств кристалла как целого. Наиболее непосредственными характеристиками локального движения данного атома являются функции распределения его координаты и импульса. Дефекты решетки,

расположенные вблизи рассматриваемого атома, могут видоизменить его колебания, а распространение колебаний по решетке приводит к взаимодействию между дефектами и взаимодействию дефектов с границами кристалла.

Ширина линий или уровней, обусловленная различными атомными, электронными и ядерными процессами в кристаллах, зависит от характера локального движения атомов в кристаллах. Одним из простейших процессов такого рода является испускание или поглощение нейтронов атомными ядрами. Например, точное определение свойств ядерных резонансных уровней по захвату медленных нейтронов в кристалле затрудняется из-за доплеровского уширения, обусловленного колебаниями решетки. Величина этого уширения зависит от функции распределения импульсов атомов в решетке [7].

Рассеяние или отражение волн правильной периодической решеткой приводит к резкой интерференционной картине в тех случаях, когда длина волны падающего излучения имеет порядок постоянной решетки. Случайные изменения расстояний между парой атомов вызывают размывание интерференционных пиков и уширение рентгеновских линий [8]. Можно ожидать, что тепловые колебания решетки приводят к уширению примесных уровней и к размытию краев зон для электронов в полупроводниках.

Теория локального движения атомов в решетке несколько сложнее теории термодинамических свойств кристалла. Это объясняется тем, что последняя оперирует только со средними характеристиками движения, в то время как первая рассматривает колебания отдельных атомов или отдельные нормальные колебания. Поэтому при составлении обзора этой теории нельзя предъявлять слишком строгие требования к получению количественных результатов. Мы попытаемся объяснить основные физические идеи, главным образом анализируя некоторые частные модели кристаллов; для них мы сможем легко провести расчеты, в общем случае невыполнимые. При этом, разумеется, следует отчетливо представлять себе возможность качественного обобщения наших результатов на реальные кристаллы.