

Ч. Киттель

**Квантовая теория твёрдых
тел**

Учебное пособие, физика

**Москва
«Книга по Требованию»**

УДК 37-053.2
ББК 74.27я7
Ч-11

Ч. Киттель

Ч-11 Квантовая теория твёрдых тел: Учебное пособие, физика / Ч. Киттель – М.: Книга по Требованию, 2012. – 492 с.

ISBN 978-5-458-35369-4

По существу книга представляет собой учебный курс физики твердого тела повышенного уровня, охватывающий все основные ее разделы. Теоретические результаты обсуждаются на конкретных экспериментальных данных. Из обширного круга проблем и задач физики твердого тела в книгу отобраны наиболее актуальные вопросы, представляющие большой научный и практический интерес. Изложение ведется на современном научном уровне, на базе тех теоретических методов, которые широко используются в оригинальных статьях, печатаемых в текущей научной литературе по физике твердого тела.

ISBN 978-5-458-35369-4

© Издание на русском языке, оформление
«YOYO Media», 2012

© Издание на русском языке, оцифровка,
«Книга по Требованию», 2012

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 первозданном 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.

Глава 15. Полупроводниковые кристаллы. II. Оптическое погло-	
щение и экситоны	338
Экситоны	342
Задачи	351
Литература	352
Глава 16. Электродинамика металлов	353
Аномальный скин-эффект	353
Циклотронный резонанс в металлах	361
Диэлектрическая аномалия	365
Распространение электромагнитных волн в магнитной плазме	367
Спиновый резонанс при обычном скин-эффекте	369
Задача	371
Литература	372
Глава 17. Акустическое затухание в металлах	373
Задачи	384
Литература	384
Глава 18. Теория сплавов	386
Задачи	418
Литература	419
Глава 19. Корреляционные функции и дифракция нейтронов	
в кристаллах	420
Борновское приближение	420
Дифракция нейтронов	423
Задачи	438
Литература	440
Глава 20. Испускание гамма-лучей без отдачи	441
Задачи	453
Литература	453
Глава 21. Применение функций Грина в физике твердого тела	
Сверхпроводимость	469
Задачи	475
Литература	475
Приложение. Теория возмущений и электронный газ	476
Литература	485
Общая библиография	486
Предметный указатель	488

ПРЕДИСЛОВИЕ ПЕРЕВОДЧИКА

Автор настоящей книги американский физик Чарлз Киттель, профессор Калифорнийского университета в Беркли (США) хорошо известен нашим читателям как по ряду его книг, вышедших в переводе в последние годы, так и по многочисленным оригинальным исследованиям в различных областях физики твердого тела, особенно физики магнетизма.

В основу книги автор положил лекции по теории твердого тела, прочитанные им для студентов-физиков старших курсов Калифорнийского университета. По характеру изложения и назначению это учебник повышенного уровня, изучение которого — после общего курса физики твердого тела — может служить следующим этапом в овладении этим предметом.

В книге приводится изложение современных способов описания и рассмотрения кристаллов, теоретический анализ наиболее важных свойств металлов, сплавов, диэлектриков, полупроводников и явлений в них с привлечением необходимых сведений об экспериментальных исследованиях. Подробно обсуждаются электрические, тепловые, магнитные свойства твердых тел основных типов. Важную и весьма ценную часть книги составляют оригинальные задачи, помещенные в конце каждой главы.

Для книги Киттеля характерно ее соответствие сегодняшним требованиям, предъявляемым к курсу физики твердого тела как научно-прикладной дисциплине. Это относится не только к уровню изложения, но и к содержанию книги. Пути подхода к каждой физической проблеме, математические средства, ход решения, методы расчета и, разумеется, сам круг вопросов тщательно отобранных автором для рассмотрения в книге — все это «быт» любого физика-теоретика, служит предметом дискуссий, активно изучается. Короче говоря, в книге отражены самые актуальные проблемы физики твердого тела. В ней приведены результаты, уже воплощенные в действующие приборы и устройства и еще находящиеся на пороге технического освоения, направления, еще далеко не исчерпанные в научно-теоретическом отношении и активно исследуемые экспериментато-

рами, а также те, которые открывают пути для новых открытий и применений.

Усвоив основной материал и перерешав предлагаемые автором задачи, читатель не только приобретет определенный комплекс необходимых знаний, но и будет достаточно вооружен для того, чтобы изучать оригинальные монографии и обзоры, разбираться в оригинальных статьях и даже самостоятельно «обсчитывать» и анализировать новые проблемы. Иначе говоря, читатель окажется на уровне, близком к тому, на котором ведутся современные исследования, излагаются современные статьи. Отсюда не следует, однако, что курс Киттеля содержит все, что должен знать молодой научный работник, специализирующийся в одной из областей физики твердого тела. Это скорее необходимый минимум, та основа, на которой можно строить более глубокое изучение конкретных проблем и переходить к самостоятельной работе. Как справедливо отмечает автор в своем предисловии, теория твердого тела столь обширна, что никакое изложение в рамках учебного курса не может быть полным. Ряд важных разделов, достаточно хорошо изложенных в других доступных читателю книгах или слишком специальных, автор сознательно не затрагивает. Примерами могут служить общая теория процессов переноса на основе кинетического уравнения, теория ядерного резонанса в твердых телах, трактовка свойств парамагнитных ионов, исходя из спин-гамильтониана, и др. Однако читатель, добросовестно изучивший настоящую книгу, едва ли встретит серьезные затруднения, когда обратится к соответствующим монографиям и обзорам. Для удобства читателей общая библиография, данная автором, дополнена при переводе основными, имеющимися на русском языке монографиями и учебниками по физике твердого тела и отдельным ее разделам. Эта библиография помещена в конце книги.

Можно надеяться, что настоящая книга окажется полезной в качестве дополнительного пособия для студентов университетов и физико-технических вузов, изучающих те или иные вопросы физики твердого тела. Преподаватели вузов найдут в ней много материала для лекций и семинаров; научные работники физики (как теоретики, так и экспериментаторы) могут пользоваться книгой как справочным пособием по теоретическим вопросам; молодым специалистам и инженерам, работающим в одном из конкретных направлений физики твердого тела, книга может помочь в повышении их научной квалификации.

А. А. Гусев

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

Задача настоящего учебника — изложить основные положения квантовой теории твердых тел для студентов, прослушавших годовой курс квантовой механики и специализирующихся в области теоретической физики, а также в области экспериментальной физики твердого тела. Книга предназначена в качестве пособия по годовому курсу квантовой теории твердых тел, читаемому для оканчивающих институт; такой курс следует непосредственно за общим курсом физики твердого тела, соответствующим по своему уровню по меньшей мере второму изданию моей предыдущей книги «Введение в физику твердого тела». В ней изложена большая часть физических основ теории, однако автор надеется, что в следующем издании ему удастся довести физическую интерпретацию результатов до уровня, который необходим для чтения настоящей книги.

Я пытался по возможности всюду подчеркивать единство в подходе к различным вопросам. Первая часть книги посвящена фоновым, магнонным и электронным волнам и их интерпретации; кульминационным пунктом этой части является теория сверхпроводимости. Во второй части книги рассматриваются поверхности Ферми и волновые функции электронов в металлах, сплавах, полупроводниках и диэлектриках, причем значительное внимание уделено интерпретации важнейших типов экспериментов, существенных для понимания обсуждаемых явлений. Третья часть посвящена корреляционным функциям и их применению к зависящим от времени эффектам в твердых телах; здесь же дано краткое введение в метод квантовых функций Грина. Последовательность глав, особенно во второй части, нельзя признать строго логичной — я пытался избежать такой концентрации материала, которая требовала бы от читателя особых усилий или распыления внимания. Первая часть является в определенной мере самостоятельным, хотя и кратким курсом теории поля и физики частиц, который, как заметил автор, оказался интересным также для студентов, специализирующихся в этих областях физики.

Некоторые важные теоретические расчеты в физике твердого тела слишком длинны, сложны, громоздки и утомительны

и поэтому не излагаются полностью. С другой стороны, схематическое изложение таких расчетов не имеет никакой педагогической ценности. В качестве примера можно привести полную теорию блоховских электронов в магнитном поле, развитую Блаутом, Ротом, Ванье, Коном и другими; эта теория в книге отсутствует, хотя менее полная трактовка изложена. Другим примером может служить теория ферми-газа, разработанная советскими физиками, а также Латинджером на основе теории Ландау; очевидно, что эта группа работ выходит за рамки книги, так же как и ряд других теоретических исследований проблемы многих тел. Такой вопрос, как свойства парамагнитных ионов в различных кристаллах, представлялся мне слишком специальным и поэтому не подходящим для включения в настоящий общий курс. При написании книги стало совершенно очевидным, что ни при каком уровне и характере изложения в учебнике, подобном данной книге, нельзя сколько-нибудь полно осветить все основные аспекты теории твердого тела — эта область физики слишком обширна. Представлялось также естественным не излагать сколько-нибудь подробно ряд вопросов, уже отраженных в ранее опубликованных и доступных читателю книгах; к числу таких вопросов относится обычная теория процессов переноса, имеющаяся, например, в книге Вильсона или в книге Займана, проблема взаимодействия фононов, изложенная в книге Пайерлса, ядерный магнетизм, которому посвящена монография Абрагама. В этих книгах перечисленные вопросы рассмотрены столь полно, что было бы нелепо заниматься пересказом. Я отказался также от попытки изложить весь материал методом функций Грина, так как опасался, что содержание книги станет тогда почти полностью недоступным экспериментаторам. Однако тем самым многим студентам предоставляется возможность взять в качестве тем для курсовых работ применения функций Грина к проблеме многих тел. Здесь не рассматривается также квантовая теория процессов переноса. Однако по многим относящимся к теме книги вопросам имеются, к счастью, отличные монографии и обзоры, в частности фундаментальная серия книг *Solid State Physics* и отдельные тома второго издания *Handbuch der Physik*. Более подробное изложение вопросов, выходящих за рамки настоящей книги, читатели могут найти как в этих изданиях, так и в других книгах, специально посвященных отдельным разделам физики твердого тела.

В настоящую книгу включены задачи, и по своему характеру она является учебником; истории развития тех или иных проблем я не касался. Я совершенно сознательно старался избегать упоминания имен, подчеркивания приоритетов и оценок

заслуг тех или иных ученых. Точные литературные ссылки и имена даются только тогда, когда неупоминание автора выглядело бы просто бестактным или же в случаях, когда работа только что появилась и еще не отражена в обзорах. Если бы я поставил себе целью дать полную библиографию, то она заняла бы столько же места, сколько и текст книги. По многим вопросам обширная библиография имеется в обзорах, опубликованных в упомянутых выше серийных изданиях. Становится все более ясно, что многие активно работающие исследователи не могут найти время ни для того, чтобы писать книги, ни для того, — если они уже и решились на это, — чтобы отметить заслуги всех своих коллег, сделавших вклад в развитие такой обширной области науки.

Ряд весьма важных результатов содержится в задачах, помещенных в конце большинства глав. Автор настоятельно рекомендует читателю прочитывать их при проработке текста, но еще лучше перерешать все задачи.

Несколько слов об обозначениях: $[\,,]$ — коммутатор; $\{\,,\}$ — антикоммутатор; обозначения c , c^+ обычно используются для фермионных операторов. Почти всюду используются единицы, в которых принято $\hbar=1$, но в конечных результатах \hbar появляется. Для блоховских функций, соответствующих состояниям с волновым вектором \mathbf{k} , используются дираковские обозначения $|\mathbf{k}\rangle$. Когда удобно, объем образца Ω мы считаем равным единичному объему; большая буква N обычно обозначает полное число частиц, малая, т. е. n , — их концентрацию. Буква Ψ обычно используется для обозначения полевых операторов, а Φ — для вектора состояния.

Считаю своим приятным долгом поблагодарить здесь ряд лиц за всю оказанную мне помощь. Коэн, Харрисон, Кон, Сул, Фридель, Бланден, Аргир, Купер, Сильверстейн, Дрейфус, Холли, Махан, Милс и Ширд предложили ряд улучшений в изложении многих вопросов. Мой коллега Хопфилд успешно разрешал бесчисленные парадоксы, которые возникали при написании книги. В Стенфорде Спаркс и его помощники (в частности, Уайт, Эдлер, Нордвед, Мотозуки и Ортенбергер) указали много ошибок в первом варианте рукописи данной книги. Пайерлс любезно согласился на то, чтобы моя книга имела то же название, что и его ранее вышедшая и в высшей степени полезная книга. Перепечатка рукописи с большим искусством была осуществлена Элинор Торнхилл, без помощи которой в Беркли было бы написано мало книг по физике. Сью Лимоли любезно помогла мне в чтении корректур.

Математическое введение

Ниже для удобства дана сводка некоторых определений и результатов, которые будут использоваться в ходе изложения в основном тексте книги.

Обратная решетка. Напомним несколько важных свойств обратной решетки. Базисные векторы обратной решетки \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* связаны с базисными векторами элементарных трансляций прямой решетки \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} соотношениями

$$\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{b}^* = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{c}^* = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}. \quad (1.1)$$

Это определение содержит множитель 2π , который в учебниках кристаллографии при введении понятия обратной решетки обычно отсутствует. При рассмотрении процессов взаимодействия волн с периодической решеткой часто приходится сталкиваться с записью закона сохранения волнового вектора, в которой появляется добавочный член в виде произведения 2π на вектор обратной решетки в кристаллографическом его определении. В связи с этим нам представляется удобным сразу включить множитель 2π в определение вектора обратной решетки. Во всех прочих отношениях наши обозначения совпадают с общепринятыми, только звездочка, разумеется, не означает комплексного сопряжения. Все базисные векторы — вещественные величины. Заметим, что $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = 2\pi$, $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = 0$ и т. д.

Из основ векторного исчисления и определения (1.1) сразу следует, что

$$V_c^* = \frac{(2\pi)^3}{V_c}, \quad (1.2)$$

где V_c^* — объем элементарной ячейки обратной решетки, а $V_c = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ — объем элементарной ячейки прямой решетки. Укажем также, что переход от сумм по волновым векторам к соответствующим интегралам производится по следующему

правилу:

$$\boxed{\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k = \frac{N}{V_c^*} \int d^3k,} \quad (1.3)$$

где объем Ω содержит N элементарных ячеек.

Теорема. Вектор $\mathbf{r}^*(hkl)$ точки hkl обратной решетки перпендикулярен плоскости (hkl) прямой решетки.

Доказательство. Заметим, что

$$\frac{1}{h} \mathbf{a} - \frac{1}{k} \mathbf{b}$$

есть вектор, лежащий в плоскости (hkl) прямой решетки (по определению индексов hkl). Но произведение

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^* \cdot \left(\frac{1}{h} \mathbf{a} - \frac{1}{k} \mathbf{b} \right) &= (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot \left(\frac{1}{h} \mathbf{a} - \frac{1}{k} \mathbf{b} \right) = \\ &= \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} - \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b} = 0, \end{aligned} \quad (1.4)$$

следовательно, вектор \mathbf{r}^* перпендикулярен к одному вектору, лежащему в плоскости (hkl) . Тем же путем можно показать, что вектор \mathbf{r}^* перпендикулярен второму вектору

$$\frac{1}{h} \mathbf{a} - \frac{1}{l} \mathbf{b},$$

лежащему в той же плоскости. Таким образом, вектор \mathbf{r}^* перпендикулярен плоскости (hkl) прямой решетки.

Теорема. Длина вектора $\mathbf{r}^*(hkl)$ равна произведению 2π на обратную величину межплоскостного расстояния $d(hkl)$ семейства плоскостей (hkl) в прямой решетке.

Доказательство. Пусть \mathbf{n} — единичный вектор нормали к данной плоскости. Тогда межплоскостное расстояние равно $h^{-1} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}$. Поскольку

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}^*}{|\mathbf{r}^*|}, \quad (1.5)$$

то для $d(hkl)$ имеем

$$d(hkl) = \frac{1}{h} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} = \frac{\mathbf{r}^* \cdot \mathbf{a}}{h |\mathbf{r}^*|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{r}^*|}. \quad (1.6)$$

Теперь перейдем к доказательству двух теорем о разложении периодических функций.

Теорема. Функцию $f(\mathbf{x})$ — периодическую с периодом решетки можно разложить в ряд Фурье по векторам \mathbf{G} обратной решетки.

Доказательство. Рассмотрим ряд

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}}. \quad (1.7)$$

Покажем, что ряд (1.7) периодичен с периодом решетки, для этого прибавим к вектору \mathbf{x} вектор решетки:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x} + m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}, \quad (1.8)$$

где m, n, p — целые числа. Тогда

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x} + m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) &= \\ &= \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}) \exp[i\mathbf{G}(m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c})]. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Поскольку \mathbf{G} — вектор обратной решетки, имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) &= (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)(m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) = \\ &= 2\pi(hm + kn + lp); \end{aligned} \quad (1.10)$$

таким образом, показатель степени второй экспоненты в (1.9) — целое число, умноженное на 2π . По определению

$$f(\mathbf{x} + m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) = f(\mathbf{x}), \quad (1.11)$$

и, следовательно, представление (1.7) обладает требуемой периодичностью.

Теорема. Если функция $f(\mathbf{x})$ периодическая с периодом решетки, то

$$\int d^3\mathbf{x} f(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} = 0, \quad (1.12)$$

если \mathbf{K} не является вектором обратной решетки.

Доказательство. Этот результат есть прямое следствие предыдущей теоремы и представляет собой, в сущности, правило отбора для переходов внутри полосы ($\mathbf{G} \neq 0$) и вне ее ($\mathbf{G} = 0$). В силу (1.7)

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}} \quad (1.13)$$

и

$$\begin{aligned} \int d^3\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) &= \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} \int d^3\mathbf{x} \exp[i(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{x}] = \\ &= \Omega \sum_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{G}} \Delta(\mathbf{K} + \mathbf{G}), \end{aligned} \quad (1.14)$$

где Δ — символ Кронекера, Ω — объем образца. Величину $\Delta(\mathbf{K} + \mathbf{G})$ можно также записать в виде $\delta_{\mathbf{K}, -\mathbf{G}}$.

Разложения в ряды Фурье по решетке. Рассмотрим ряд

$$q_r = N^{-1/2} \sum_k Q_k e^{ikr} \quad (1.15)$$

Допустимые значения k обычно определяют из периодических граничных условий

$$q_{r+N} = q_r,$$

считая $e^{ikN} = 1$. Эти условия удовлетворяются для $k = 2\pi n/N$, где n — произвольное целое число. Среди всех возможных n имеется лишь N значений, дающих N независимых координат q_r . Удобно считать число N четным и пользоваться следующими N значениями n : $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \left(\frac{1}{2}N - 1\right), \frac{1}{2}N$.

Заметим, что числа $\frac{1}{2}N$ и $-\frac{1}{2}N$ приводят к одинаковым значениям e^{ikr} для всех r . По этой причине последним n в нашем наборе надо взять $\frac{1}{2}N$. Значение $n=0$, соответствующее $k=0$, отвечает так называемому *нормальному колебанию*, когда все q_r равны и поэтому не зависят от индекса r .

Т е о р е м а. Если имеет место (1.15), то

$$Q_k = N^{-1/2} \sum_s q_s e^{-iks}. \quad (1.16)$$

Доказательство. Подставим (1.16) в (1.15):

$$q_r = N^{-1} \sum_{ks} q_s \exp[ik(r-s)]. \quad (1.17)$$

Если положить $s=r$, то сумма по k дает Nq_r , т. е. требуемый результат. Если же разность $r-s=\sigma$, где σ — некоторое целое число, то при $\sigma \neq 0$

$$\begin{aligned} \sum_n \exp(ik\sigma) &= \sum_n \exp(i2\pi n\sigma/N) = \\ &= \sum_{n=0}^{\frac{1}{2}N} \exp(i2\pi n\sigma/N) + \sum_{n=1}^{\frac{1}{2}N-1} \exp(-i2\pi n\sigma/N) = \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} \exp(i2\pi n\sigma/N) = \frac{1 - \exp(i2\pi\sigma)}{1 - \exp(i2\pi\sigma/N)} = 0. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Итак, мы имеем соотношение ортогональности

$$\sum_k \exp[ik(r-s)] = N\delta_{sr}. \quad (1.19)$$