

Министерство образования и науки, молодежи и спорта Украины
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

В. К. Милославский, Л. А. Агеев

СПЕКТРОСКОПИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебное пособие
для студентов старших курсов,
аспирантов и научных работников

Харьков – 2013

УДК 535.34
ББК
М 60

Рецензенты:

Малюкин Ю. В. – доктор физико-математических наук, профессор, заместитель директора по науке института сквнтилляционных материалов НАН Украины.

Шульга С. Н. – доктор физико-математических наук, профессор, декан радиофизического факультета Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина.

*Утверждено к печати решением Ученого совета
Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина
(Протокол № 3 от 24.02.2012 г.)*

Милославский В.К.

М 60 Спектроскопия твердого тела: учебное пособие для студентов старших курсов, аспирантов и научных работников / В. К. Милославский, Л. А. Агеев. – Х.: ХНУ В.Н. Каразина, 2013. – 276 с.

ISBN 978-966-623-760-9

В учебном пособии изложены основные положения теории оптических спектров твердых тел и экспериментальные методы их исследования. Показаны трудности в анализе спектров поглощения кристаллов и их преодоление. Для классификации спектров и правил отбора при оптических переходах привлечена теория групп и их неприводимых представлений. В пособии приведены иллюстративный материал, демонстрирующий спектры наиболее изученных металлов, полупроводников и диэлектриков и приведен их анализ. Введены также главы, посвященные современным исследованиям спектров наноструктур и двух- и одномерных кристаллов.

Главы пособия сопровождаются вопросами и заданиями для самостоятельной работы студентов.

Пособие предназначено для студентов старших курсов физических факультетов университетов, аспирантов и научных работников заданного профиля.

**УДК 535.34
ББК**

ISBN 978-966-623-760-9

© Харьковский национальный университет
имени В. Н. Каразина, 2013

© Милославский В. К., Агеев Л. А., 2013

© Будник О. В., макет обложки, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	6
I. СТРУКТУРА И СИЛЫ СВЯЗИ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ.....	7
1.1. Структура твердых тел.....	7
1.2. Силы связи в твердых телах.....	8
Литература к главе I.....	14
II. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И СПЕКТРЫ МЕТАЛЛОВ	16
2.1. Оптические спектры металлов и теория Друде.....	16
2.2. Твердотельная плазма в металлах.....	21
2.3. Поверхностные плазменные волны	24
2.4. Колебания плазмы в малых металлических частицах и их оптическое проявление	30
2.5. Методы измерения оптических констант.....	35
Вопросы и задания к главе II.....	41
Литература к главе II	41
III. КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ И ИХ СОБСТВЕННЫЕ ЧАСТОТЫ.....	44
3.1. Колебания периодических линейных цепочек.....	44
3.2. Колебания сложной кристаллической решетки.....	49
Вопросы и задания к главе III.....	56
Литература к главе III.....	56
IV. ТЕОРИЯ ГРУПП И СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ.....	57
4.1. Основы абстрактной теории групп.....	57
4.1.1. Введение. Определение группы	57
4.1.2. Классы самосопряженных элементов.....	58
4.1.3. Разбиение группы по подгруппе в левые и правые классы	59
4.1.4. Изоморфные и гомоморфные группы	60
4.2. Представления конечных групп	61
4.2.1. Понятие о представлении групп. Базис представлений.....	61
4.2.2. Переход к новому базису. Преобразование подобия.....	62
4.2.3. Приводимые и неприводимые представления группы.....	63
4.2.4. Основные свойства неприводимых представлений	64
4.2.5. Характеристики представления группы	64
4.3. Симметрия кристаллов и соответствующие им группы	67
4.3.1. Пространственная группа симметрии	67
4.4. Неприводимые представления пространственных групп.....	71
4.4.1. Группа трансляции и её неприводимые представления.....	71
4.4.2. Первая зона Бриллюэна и её построение.....	74
4.4.3. Неприводимые представления пространственной группы.....	76
4.4.4. Группа волнового вектора и её неприводимые представления.....	77
4.4.5. Нормальные координаты и теорема Вигнера.....	79
4.5. Теоретико-групповой анализ колебаний кристаллов и молекул	81

4.5.1. <i>Общий подход. Анализ колебаний молекул</i>	81
4.5.2. <i>Анализ колебаний кристаллов. Метод обобщенных координат</i>	83
<i>Вопросы и задания к главе IV</i>	89
<i>Литература к главе IV</i>	89
V. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТА С КОЛЕБАНИЯМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ	91
5.1. <i>Введение</i>	91
5.1.1. <i>Спектры поглощения и условия их возникновения</i>	91
5.1.2. <i>Спектры комбинационного рассеяния света. Правила отбора</i>	94
5.2. <i>Однофононные спектры отражения и КРС первого порядка</i>	97
5.2.1. <i>Основные уравнения возбуждения фундаментальных колебаний</i>	97
5.2.2. <i>Понятие о поляритонах колеблющейся решетки</i>	98
5.2.3. <i>Форма фундаментальных полос отражения. Теория и эксперимент. Влияние анигармоничности колебаний на форму полос</i>	101
5.2.4. <i>Комбинационное рассеяние света. Эксперимент и понятие о внешних и внутренних колебаниях</i>	105
5.3 <i>Инфракрасные спектры, связанные с колебаниями высшего порядка</i>	108
5.3.1. <i>Основные положения. Поляризация высшего порядка</i>	108
5.3.2. <i>Двух- и трехфононное поглощение. Эксперимент и его обсуждение</i>	111
<i>Вопросы и задания к главе V</i>	114
<i>Литература к главе V</i>	114
VI. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ..	115
6.1. <i>Общий подход к нахождению энергетического спектра</i>	115
6.2. <i>Адиабатическое приближение</i>	116
6.3. <i>Одноэлектронное приближение</i>	117
6.4. <i>Метод Хартри – Фока</i>	118
6.5. <i>Учет симметрии кристаллов в одноэлектронном уравнении Шредингера</i>	120
6.6. <i>Электронный спектр металлов. Квантовая теория Зоммерфельда</i>	121
6.7. <i>Электронный спектр в приближении почти свободных электронов</i>	124
6.8. <i>Электронный спектр в полупроводниках и диэлектриках</i>	130
6.9. <i>Скорость и ускорение электронов в кристаллах. Понятие об эффективной массе электронов</i>	132
6.10. <i>$\vec{k}\vec{r}$ - метод расчета уровней энергии в полупроводниках</i>	138
6.11. <i>Метод сильной связи</i>	141
6.12. <i>Плотность состояний в разрешенных зонах и заполнение зон электронами</i>	149
6.13. <i>Спинорбитальное взаимодействие и двойная группа симметрии</i>	153
<i>Вопросы и задания к главе VI</i>	158
<i>Литература к главе VI</i>	159

VII. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИКАХ И ВЛИЯНИЕ НА СПЕКТР ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ.....	160
7.1. Междузонное поглощение света.....	160
7.2. Влияние давления и температуры на электронные спектры в кристаллах.....	170
7.3. Влияние однородного электрического поля на электронный спектр полупроводников.....	174
7.4. Влияние магнитного поля на электронный спектр полупроводников и магнитооптические эффекты.....	180
7.5. Электронный спектр и оптические свойства графена и графита.....	192
Вопросы и задания к главе VII.....	203
Литература к главе VII.....	204
VIII. ЭКСИТОНЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИКАХ.....	207
8.1. Общие соображения.....	207
8.2. Экситоны Френкеля.....	208
8.3. Давыдовское расщепление.....	212
8.4. Экситоны Ваннье – Мотта.....	215
8.5. Экситоны в полупроводниках.....	219
8.6. Теория Эллиотта экситонных спектров поглощения.....	223
8.7. Экситоны в щелочно галоидных кристаллах.....	227
8.8. Экситоны в анизотропных кристаллах.....	228
8.9. Влияние внешних воздействий на экситоны в полупроводниках и диэлектриках.....	234
Вопросы и задания к главе VIII.....	242
Литература к главе VIII.....	243
IX. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ПРИМЕСЕЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ.....	246
9.1. Общие замечания.....	246
9.2. Доноры и акцепторы в полупроводниках и их электронный спектр.....	246
9.3. Электрические и оптические свойства полупроводников с мелкими примесями.....	252
9.4. F- центры в щелочно-галоидных кристаллах и их спектры.....	260
9.5. Спектры ионов переходных металлов и редкоземельных элементов в диэлектриках.....	264
Вопросы и задания к главе IX.....	271
Литература к главе IX.....	272

