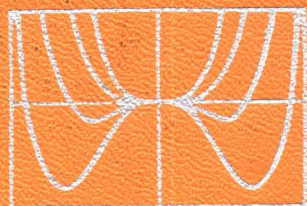


ДЖ. СЛЭТЕР

ДИЭЛЕКТРИКИ
ПОЛУПРОВОДНИКИ
МЕТАЛЛЫ





ИЗДАТЕЛЬСТВО
«МИР»

QUANTUM THEORY OF MOLECULES AND SOLIDS
VOLUME 3

INSULATORS, SEMICONDUCTORS
AND METALS

JOHN C. SLATER

Graduate Research Professor, University of Florida
Institute Professor,
Massachusetts Institute
of Technology

MCGRAW-HILL BOOK COMPANY, INC.
NEW YORK - ST. LOUIS - SAN FRANCISCO -
- TORONTO - LONDON - SYDNEY
1967

Дж. СЛЭТЕР

ДИЭЛЕКТРИКИ,
ПОЛУПРОВОДНИКИ,
МЕТАЛЛЫ

Перевод с английского

Е. Г. ЛАНДСБЕРГ, А. Г. МИРОНОВА
Н. С. РЫТОВОЙ, Э. М. ЭПШТЕЙНА

Под редакцией

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧА

Предлагаемая вниманию читателей книга, посвященная основам физики твердого тела, входит в серию книг автора «Квантовая теория молекул и твердых тел». (Ранее, в 1963 г., был издан перевод первой книги этой серии «Электронная структура молекул».)

Автор книги, крупный американский физик-теоретик, специалист в области физики твердого тела, квантовой химии, электроники, известен нашим читателям-физикам по его оригинальным исследованиям и ряду книг, в том числе изданных и в русском переводе.

В данной книге охвачен широкий круг проблем теории твердого тела от классической динамики кристаллической решетки до современных проблем электронной теории. Подробно рассмотрены свойства диэлектриков, полупроводников и металлов. Большое внимание уделяется, в частности, классическим исследованиям, результаты которых полностью сохраняют актуальность и в настоящее время. Важной частью книги является обширная библиография основных оригинальных работ, монографий и учебников по всем разделам физики твердого тела.

По характеру и уровню изложения книга представляет собой учебник физики твердого тела, предназначенный, с одной стороны, для преподавателей и студентов, а с другой — для научных работников — физиков, как экспериментаторов, так и теоретиков.

Редакция литературы по физике

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Очень богата содержанием книга Слэтера, представляющая собой третий том его серии «Квантовая теория молекул и твердых тел». Диапазон ее простирается от классической теории колебаний решетки до задач квантовохимического характера. И все же одного ей явно не хватает. Ей не хватает эпиграфа. А он напрашивается. «Ново все то, что хорошо забыто» — под этим лозунгом написана солидная часть книги (гл. 1, 4—7, 9). Собственно, автор этого и не скрывает, ясно говоря в своем предисловии к американскому изданию: «...еще слишком много молодых людей, специализирующихся по физике твердого тела, вырастают с весьма туманными представлениями о том большом прогрессе в понимании предмета, который был достигнут до создания волновой механики в 1926 г. В настоящем томе я попытался в какой-то мере осветить эту сторону дела».

Нельзя не признать, что со своей задачей автор справился блистательно, и работы старых мастеров отражены в книге с той подробностью, какой они и в самом деле заслуживают. Именно это резко выделяет книгу Слэтера среди всех других современных учебников и монографий по теории твердого тела. Вряд ли нужно говорить, насколько это интересно и полезно для научной молодежи, и не только для молодежи. Особый «вкус» книге придает тот факт, что автор ее лично переживал многие перипетии той борьбы за истину, о которой он рассказывает; в книге имеются разделы, с полным основанием написанные «из первых рук».

Не исключено, что с этим связаны и особенности стиля книги, местами более напоминающей обработанную запись лекций, нежели учебник обычного типа. К сожалению, такой манере изложения обычно бывает присуща известная субъективность, и не со всеми точками зрения автора редактор может полностью согласиться. Это относится, в частности, к гл. 11, в которой сопоставляются одноэлектронный и многоэлектронный подходы в теории твердого тела.

«Личный» характер книги, по-видимому, проявляется и в некоторой неровности изложения. Большинство глав написано

очень «физично» и ясно; вместе с тем чтение гл. 10 и 11 требует довольно большой предварительной подготовки.

Еще одна особенность книги состоит в необычайно большом списке литературы¹⁾. За немногими исключениями, в нем собраны едва ли не все важнейшие работы по излагаемым в книге вопросам теории твердого тела (отдельные пропуски, относящиеся к работам советских физиков, редактор старался восполнить). Это сочетание учебника с библиографическим справочником (в лучшем смысле слова!) придает книге совершенно уникальный характер, и ценность этого сейчас, когда мы едва ли не захлебываемся в потоке информации, трудно переоценить.

К сожалению, ряд важных задач теории твердого тела, относящихся в основном к различного рода коллективным явлениям (сверхпроводимость, ферромагнетизм и т. д.), не рассмотрен в книге. Это отложено до следующего тома серии, и нам остается только ожидать его выхода в свет.

Представляя собой один из томов единой серии, книга Слэтера содержит множество ссылок на предыдущий, второй том, который не переведен на русский язык. Для удобства читателей в переводе эти ссылки иногда заменены ссылками на эквивалентные русские издания. В качестве общего руководства можно рекомендовать книгу Ч. Киттеля «Квантовая теория твердых тел», М., 1967.

Несомненно, эта книга окажется полезной научным работникам — физикам (теоретикам и экспериментаторам), а также студентам, специализирующимся в любой из областей физики твердого тела.

Перевод книги выполнили: Е. Г. Ландсберг (гл. 1 и 2); Н. С. Рытова (гл. 3—5); Э. М. Эпштейн (гл. 6—10); А. Г. Миронов (гл. 11, приложения); И. З. Пинскер (библиография).

В. Л. Бонч-Бруевич

¹⁾ Кроме библиографии, помещенной в конце книги, имеются списки литературы в конце каждой главы. Ссылки на литературу к данной главе обозначаются цифрами над строкой (например, [6]); ссылки на общую библиографию даются цифрами на строке (например, [67]). — *Прим. ред.*

ПРЕДИСЛОВИЕ

В предисловии ко второму тому этой серии, озаглавленному «Симметрия и энергетические зоны в кристаллах», я указал, что в третьем томе предполагаю рассмотреть следующие темы: колебания кристаллической решетки, взаимодействие колебаний решетки с электронами, вытекающая отсюда теория проводимости (включая и проводимость в магнитном поле), многие экспериментальные методы исследования кристаллов, основанные на решении названных задач. Затем я планировал рассмотреть взаимодействие электромагнитных волн с кристаллами, включая оптические и диэлектрические явления, и связь этой задачи с зонной теорией. Иными словами, я рассчитывал перейти к экспериментальным аспектам зонной теории, рассматривая предполагаемую книгу как равноправное дополнение ко второму тому, в котором изложены методы расчета энергетических зон в кристаллах. Все эти вопросы более или менее подробно освещены в настоящем томе «Диэлектрики, полупроводники, металлы». Кроме того, рассматривается еще одна тема, которую сначала предполагалось отложить до четвертого тома; речь идет об энергии связи в кристаллах, включая многоэлектронную трактовку твердого тела (в очень предварительном и сокращенном виде). Таким образом, на долю четвертого тома (я надеюсь, заключительного тома этой серии) остаются, как указано в предисловии ко второму тому, магнитные свойства — парамагнетизм, ферромагнетизм, диамагнетизм — и сверхпроводимость, а также ряд других задач: более полная трактовка проблемы многих тел, рассмотрение различных типов возбуждений в кристаллах (экситонов, поляронов, спиновых волн и др.).

Во всем этом круге задач, откладываемых до четвертого тома, есть нечто общее, а именно: в них идет речь о взаимодействии разных видов движения в твердом теле. К их числу относится движение электронов, колебания или смещения решетки, влияние спина, электромагнитное поле — либо действующее извне, либо созданное электрическими и магнитными источниками внутри твердого тела. Именно тонкая взаимосвязь

различных типов движения делает столь сложным изучение реальных эффектов в твердых телах. О некоторых из названных взаимодействий трудно было бы даже подумать, оставаясь в рамках зонной теории идеального кристалла с покоящимися ядрами (который изучался во втором томе). Чтобы разобраться во всех тонкостях, связанных с полным описанием твердого тела, читатель должен приобрести весьма обширные сведения из самых различных отраслей физики — механики, электромагнитной теории, термодинамики, статистической механики — и все это на микроскопическом (атомном) уровне. Основная цель, которую автор преследовал при написании настоящего тома, состоит в том, чтобы дать читателям некоторые из этих основных сведений. Побочная цель состоит в описании экспериментального аспекта исследования энергетических зон на достаточно современном уровне. Это позволит охватить широкий круг явлений, взаимосвязь между которыми устанавливается и объяснение которых производится с позиций современной теории твердого тела.

В соответствии с поставленной задачей автор решил придерживаться несколько иной манеры изложения, чем в других томах этой серии. Мы не будем рассматривать многочисленные новые аспекты квантовой теории. Фактически читатель увидит, что квантовая теория вообще используется здесь довольно мало. Мы будем рассматривать колебания решетки, электромагнитные волны, рассеяние рентгеновских лучей, электростатическую энергию связи ионных кристаллов и ряд других задач, многие из которых были решены еще до появления волновой механики, когда возникали только самые первые понятия квантовой теории. Естественно поэтому ожидать, что в настоящем томе мы будем оглядываться назад в гораздо большей степени, чем в других томах этой серии, и будем придерживаться большей частью исторической точки зрения. Рассмотрение почти каждой задачи начинается здесь примерно с начала текущего столетия, но доводится вплоть до наших дней. В течение некоторого времени эти более ранние разделы теории твердого тела были в незаслуженном пренебрежении у научных работников и преподавателей. Сейчас в связи с возродившимся интересом к колебаниям решетки, оптическим явлениям в твердом теле и т. д. исследователи и преподаватели вновь возвращаются к этой тематике. Однако еще слишком много молодых людей, специализирующихся по физике твердого тела, вырастают с весьма туманными представлениями о том большом прогрессе в понимании предмета, который был достигнут до создания волновой механики в 1926 г. В настоящем томе я попытался в какой-то мере осветить эту сторону дела.

Принятые здесь математические методы выбирались по возможности наиболее простыми. В наши дни слишком много преподавателей физики твердого тела первоначально выросли как специалисты по квантовой теории поля. Они стремятся выразить любую даже самую простую вещь на математическом языке большой сложности. В теории твердого тела существуют задачи, действительно требующие усложненного аппарата; мы столкнемся с ними в четвертом томе. Однако в интересах физической наглядности и общей доступности изложения мне кажется крайне желательным всюду, где только возможно, обходиться простейшими математическими средствами. Физики первых лет нашего века, те, кто заложил фундамент современной теории твердого тела, в основном стояли на таких же позициях, с максимальной экономией используя математику. Мне кажется, что именно это во многом определяет феноменальный прогресс, который столь быстро был достигнут в теории твердого тела после открытия волновой механики. Именно по этой причине я повсюду и использовал простейшие возможные методы.

В силу простоты математического аппарата, о которой я только что говорил, а также потому, что предмет настоящего тома восходит к более ранним разделам классической физики, эта книга, вероятно, легче для чтения и более приспособлена к роли элементарного учебника по теории твердого тела, чем предыдущие тома этой серии или чем следующий том. Здесь лишь очень немногое может оказаться недоступным читателю, хорошо знакомому с классической физикой и имеющему элементарные сведения из квантовой механики. Правда, зонная теория считается известной на уровне второго тома этой серии («Симметрия и энергетические зоны кристаллов»); фактически, однако, для понимания большей части книги нужно обладать только самыми поверхностными сведениями по этому предмету. Преподаватель, планирующий курс теории твердого тела, вполне мог бы счесть целесообразным сначала изложить материал настоящего тома и лишь потом перейти к более подробной квантомеханической теории, изложенной в других томах.

На одной из тем я остановился гораздо подробнее, чем это обычно делается. Речь идет о рассеянии и дифракции рентгеновских лучей и о связи этих явлений с колебаниями решетки. Постепенно все более осознается, что рентгеновские методы и кристаллографические данные, получаемые с их помощью, составляют существенную часть физики твердого тела. Материал настоящего тома вместе с описанием кристаллических структур и с теорией симметрии (том второй) дает читателю довольно полное представление об основных чертах

рентгеновской кристаллографии. Этого достаточно для дальнейшего изучения более специальных трудов на данную тему. Помимо того что настоящий том дает физикам, занимающимся твердым телом, некоторые сведения о рентгеновских методах, он также позволит специалистам по рентгеновской кристаллографии узнать нечто такое, чего многие из них не знают. Удивительно, например, как мало специалистов по дифракции электронов знают, что в сущности их задача о движении электронов в кристаллах как раз и решается (с помощью гораздо более изощренных методов) в современной зонной теории.

Несколько лет назад я написал обзорную статью «Взаимодействие волн в кристаллах»¹⁾, в которой пытался единым образом рассмотреть некоторые аспекты задач о движении электронов в кристаллах (с точки зрения квантовой механики), о распространении рентгеновских лучей в кристаллах и о взаимодействии тех и других с колебаниями решетки. Мне казалось, что это может быть интересно как кристаллографам, так и физикам. Статья оказалась очень популярной. В известном смысле весь этот том можно считать ее расширенным изданием.

Библиография в настоящей книге значительно более обширна, чем в любом другом томе этой серии. Дело в том, что здесь мы встречаемся с проблемами, которым было посвящено много экспериментальных работ; в большинстве их содержатся и теоретические выводы, в силу чего их надлежит включить в любой адекватный библиографический список. Последний оказался столь большим, что автору пришлось применить различные способы, чтобы облегчить пользование им. Один из таких способов состоит в разделении библиографии на части по хронологическому признаку (статьи, появившиеся до 1946 г. и позже). Вторая часть списка значительно больше первой, зато именно к раннему периоду относится большинство основополагающих работ. Они лучше выделяются, если не разбавлять их огромным числом статей послевоенного периода. Второй способ заключается в том, чтобы включить в самый текст книги многочисленные перечни авторов с указанием дат статей, относящихся к тем или иным конкретным темам. Эти перечни могут служить указателями к основной библиографии, в которой приведены более подробные литературные ссылки. При всем своем большом объеме наш библиографический список далеко не полон. В оправдание я могу сказать лишь, что он настолько полон, насколько автор мог этого добиться, не отказываясь от попытки закончить книгу; к тому же он занимает так много ме-

¹⁾ J. C. Slater, Rev. Mod. Phys., 30, 197 (1958).

ста, что может, вероятно, угодить на все вкусы. Так же, как и в предыдущих томах этой серии, я полагаю, что библиографический список становится значительно полезнее, если включить в него и названия статей, а не только наименования журналов и номера страниц.

Как и в предыдущих книгах этой серии, я хочу выразить свою признательность моим коллегам по Группе теории твердого тела и теории молекул в Массачусетском технологическом институте, а также моим новым коллегам по Отделу квантовой теории в Университете шт. Флорида за их помощь в связи с данной работой. Я хотел бы поблагодарить также Национальный научный фонд за поддержку как в Массачусетсе, так и в Джейнсвилле. Я благодарен Отделу военно-морских исследований за помощь Массачусетскому технологическому институту, которая сделала возможным существование исследовательских групп и сильно способствовала развитию тех областей физики, о которых я писал в этих томах.

Дж. Слэтер

Глава I

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ПРИБЛИЖЕНИЕ СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

§ 1. Теория металлов по Друде — Лорентцу

Одна из задач настоящей книги заключается в том, чтобы показать, какой гигантский скачок в исследовании твердого тела произошел в связи с появлением квантовой механики, в частности вследствие развития зонной теории, уже обсуждавшейся в т. 2 [1]¹⁾. Классификация твердых тел на диэлектрики, металлы и промежуточный класс полупроводников является одним из самых очевидных фактов в физике твердого тела. Эта классификация основывается в первую очередь на величине электропроводности, но влечет за собой и некоторые выводы относительно оптических свойств вещества. Действительно, диэлектрики прозрачны, металлы непрозрачны в видимой области, полупроводники непрозрачны в видимой области, но становятся прозрачными в инфракрасной. До развития зонной теории, последовавшего сразу же после создания квантовой механики в 1926 г., мы не могли ясно понять причину такого различия. Правда, имелись указания, что металлические свойства определяются наличием свободных электронов, а тот факт, что в изолированных атомах металла электроны легко отрываются от атома, давал основание считать электроны в кристалле свободными. Напротив, диэлектрики могли бы состоять из ионов со структурой инертного газа, неспособных легко терять электроны и превращаться в проводники. Однако это были смутные и чисто качественные идеи.

В течение очень короткого времени после 1926 г. эти загадки были полностью разъяснены, и мы получили довольно четкое представление о различии между этими веществами. Как уже говорилось в первых двух томах этой серии, диэлектрики — это вещества, нижние энергетические зоны которых полностью заполнены, а пустые верхние зоны отделены от них достаточно широкими запрещенными промежутками. В металлах, напротив, верхние зоны заполнены лишь частично, вплоть

¹⁾ Том 2 этой серии пока не переведен на русский язык. В дальнейшем ссылки на него будут по возможности заменяться ссылками на эквивалентные русские издания. Для ознакомления с основами зонной теории можно рекомендовать, например, книги [21—23]. — *Прим. ред.*

до энергии Ферми, а все уровни, лежащие выше, пусты. В полупроводниках, как и в диэлектриках, имеются запрещенные зоны, но значительно более узкие — такие, что инфракрасный квант с энергией $h\nu$ обычно способен перевести электрон из нижней заполненной зоны (валентной) в ближайшую верхнюю незаполненную (зону проводимости).

Теория, однако, продвинулась значительно дальше и притом очень быстро. Это произошло потому, что к 1926 г., когда появилась квантовая механика, уже существовала хорошо развитая теория твердого тела. В применении ко многим свойствам кристаллов теория имела уже практически тот же вид, что и в настоящее время. В результате квантовая механика, хотя она еще далека от полного объяснения всех свойств твердого тела, составила нечто вроде заключительного штриха, позволившего объединить все существовавшие тогда теории в единое целое. Это и составило основу дальнейшего многостороннего и быстрого развития. Почти невозможно понять современную теорию твердого тела, не зная этих ранних аспектов теории, созданной до 1926 г. Именно поэтому в настоящем томе мы обратим особое внимание на основные черты старой теории твердого тела, которые вошли и в наши современные представления.

Такое изложение должно убедить читателя в полной ошибочности широко распространенного мнения о том, что физика твердого тела есть достижение только самых последних лет. Следует, правда, сказать, что число работ, опубликованных в этой области после войны, т. е. с 1946 г., во много раз больше, чем до этого. Точно так же многие из экспериментальных методов были созданы после войны. Эти факты ярко иллюстрируются библиографией, находящейся в конце этого тома; последняя разделена на две части: первая часть — список статей, опубликованных до 1946 г., вторая — список более поздних работ. Эта вторая часть значительно больше первой. Однако наши теоретические представления уже к 1939 г. достигли замечательной полноты. Как сказано выше, основные вопросы были очень тщательно изучены уже к 1926 г. Более того, даже к 1900 г. в понимании твердого тела был достигнут существенный прогресс.

Прошлый век был периодом изучения объемных свойств вещества, а также достаточно полного развития кинетической теории газов. В это же время была понята общая природа молекул и началось накопление сведений об электронах, ионах и электронных свойствах веществ. Многие как теоретические, так и экспериментальные данные в области твердого тела были получены до 1900 г. Так, исследование свойств симметрии кри-

сталлов, изучение пространственных групп и т. д. (см. [1]) было завершено в основном до 1900 г. Такие проблемы, как упругость кристаллов, их оптические свойства (например, двойное лучепреломление), термические и электрические свойства, пьезоэлектричество, и многие другие были уже детально изучены и описаны в некоторых случаях более полно, чем в последующее время.

Существует монументальная книга «Учебник кристаллофизики», написанная Фогтом в 1910 г. [2]. В ней собран материал, относящийся ко многим названным темам, причем он основан главным образом на работах, выполненных до 1900 г. или вскоре после него. Некоторые из задач, рассматриваемых в этой книге, показывают, насколько высоко была развита физика твердого тела в тот период. Таковы, например, главы, посвященные симметрии кристаллов и общему рассмотрению их векторных и тензорных свойств, главы, посвященные механике, термодинамике, электрическим и магнитным свойствам твердого тела. Вслед за этим описываются такие специфические явления, как пирозлектричество, пиромагнетизм, тепловое расширение, электрическая и термическая проводимости, диэлектрические явления, пара- и диамагнетизм, ферромагнетизм, термоэлектричество, упругость, внутреннее трение, пьезоэлектричество и пьезомагнетизм, причем излагается не просто качественная теория. Речь идет о тщательном математическом расчете, во многих случаях более основательном, чем имеющиеся во многих современных учебниках.

Как уже отмечалось, к 1900 г. были не только изучены теоретически и экспериментально эти объемные свойства твердого тела, но и началось также изучение электронной структуры вещества. Работы Томсона и других привели к довольно ясному пониманию свойств электронов, хотя представление о ядерном строении атома появилось более чем 10 лет спустя. Ионы в растворах были изучены хорошо, равно как и проводимость электронов. Началось активное изучение электропроводности газов. Казалось вполне естественным попытаться объяснить явления электропроводности и теплопроводности металлов, термоэлектрические эффекты, эффект Холла и т. д., исходя из движения электронов. Оптические свойства твердого тела также экспериментально изучались в течение многих лет. В частности, было хорошо изучено явление аномальной дисперсии. За некоторое время до этого Зельмейер высказал мысль, что явления преломления и поглощения света в твердом теле можно понять, допустив, что твердые тела содержат колеблющиеся частицы. Последние должны приводиться в движение световой волной и

в свою очередь влиять на ее поле, что и приводит к наблюдаемым оптическим свойствам вещества.

Пришло время для создания законченной электронной теории твердого тела, и в 1900 г. Друде [3] впервые предложил удовлетворительную теорию такого типа. В своих первых работах он рассмотрел электрическую и термическую проводимость, термоэлектрические свойства и некоторые связанные с ними проблемы. Позднее он перешел к оптическим свойствам. Лорентц [4, 5]¹⁾ развил эти работы и дал объяснение некоторым другим явлениям, таким, например, как эффект Зеемана. Успехи Друде и Лорентца были весьма существенными для последующих работ и для всего того, о чем мы будем говорить в ближайших нескольких главах. По этой причине представляется целесообразным изложить в настоящей главе объяснение электропроводности, данное названными авторами, а позднее, в гл. 4 и 5, — предложенную ими трактовку оптических свойств вещества. Во многих отношениях подход Друде и Лорентца и теперь сохранил свое значение, несмотря на очень большой прогресс в нашем понимании природы твердого тела, а также на появление квантовомеханических основ теории.

§ 2. Свободные электроны

Рассматривая электропроводность металлов, Друде и Лорентц исходили из предположения, что в единице объема металла содержится N электронов с зарядом $-e$ (мы будем обозначать через e абсолютную величину заряда, т. е. положительное число). При движении через вещество электрон должен сталкиваться с атомами, что, как показали названные авторы, эквивалентно наличию силы сопротивления, пропорциональной скорости. Таким образом, постулируется, что электроны с массой m , перемещающийся под действием электрического поля напряженностью E , подчиняется следующему уравнению движения:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -eE - mg \frac{dx}{dt}. \quad (1.1)$$

Здесь член $-mgdx/dt$ описывает силу сопротивления, пропорциональную скорости. Решение уравнения (1.1) с начальным условием, согласно которому при $t=0$ скорость равна нулю, имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = v = -\frac{eE}{mg} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right) \right], \quad t_0 = \frac{1}{g}. \quad (1.2)$$

¹⁾ В книге [5] дан великолепный обзор работ на эту тему, включая и исследования, выполненные значительно ранее.

Это означает, что спустя некоторое время, по порядку величины равное t_0 , скорость электрона v будет снижаться до значения $-eE/mg$, пропорционального напряженности поля. Это значение получается из уравнения (1.1), если положить ускорение равным нулю. Вскоре мы убедимся, что это время t_0 очень мало. Соответственно в большинстве практически интересных случаев можно считать, что стационарное состояние с постоянной скоростью достигается мгновенно.

При N электронах в единице объема плотность тока J будет равна $-Nev$. Таким образом,

$$J = \frac{Ne^2}{mg} E = \sigma E, \quad \text{где} \quad \sigma = \frac{Ne^2}{mg}. \quad (1.3)$$

Это — закон Ома, причем величина σ играет роль электропроводности, т. е. обратного удельного сопротивления. Комбинируя (1.3) с (1.2), можно получить и другое выражение для электропроводности, а именно

$$\sigma = \frac{Ne^2}{m} t_0. \quad (1.4)$$

Если определить величину σ из опыта, предположить, что число N по порядку величины соответствует одному электрону на атом, и подставить вместо m массу электрона, то из формулы (1.4) можно оценить t_0 . Проведя это для металла, мы получим крайне малую величину t_0 . Тем самым оправдывается сделанное ранее утверждение о том, что после приложения ускоряющей силы состояние с постоянной скоростью достигается почти мгновенно.

Величине t_0 можно придать и несколько иной смысл. Для этого рассмотрим решение (1.1) для случая, когда напряженность поля равна нулю, но при $t=0$ скорость имеет некоторое значение v_0 , отличное от нуля. Получим

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right). \quad (1.5)$$

Отсюда явствует, что t_0 есть время, необходимое для того, чтобы начальная дрейфовая скорость электронов уменьшилась в $1/e$ раз.

Часто бывает удобно написать полученные выше формулы в ином виде. Определим подвижность заряженной частицы в электрическом поле как скорость, которую эта частица приобретает в поле единичной напряженности. Величина скорости стационарного движения определяемая равенством (1.2), составляет eE/m . Следовательно, подвижность μ равна e/mg .

Соотношение (1.3), выраженное через подвижность, запишется в виде

$$\sigma = Ne\mu. \quad (1.6)$$

Для хороших проводников экспериментально получены значения подвижности порядка сотен $\text{см}^2/\text{в} \cdot \text{сек}$. При этой оценке полагалось, что величина N по порядку близка к одному электрону на атом или же определяется по эффекту Холла, как это будет описано в следующей главе.

Нетрудно пойти несколько дальше простых формул, пытаясь выяснить механизм силы сопротивления. Согласно Лорентцу, ее можно рассматривать как результат столкновений электрона с атомами. Простейшая статистическая аппроксимация состоит в предположении, что электрон ускоряется в течение среднего времени свободного пробега t_1 , а затем испытывает столкновение, теряя при этом всю набранную им скорость. Скорость электрона через время t после столкновения получается из уравнения (1.1) без последнего слагаемого; она равна $v = -(eE/m)t$. Следовательно, средняя скорость за время свободного пробега будет $v_{\text{ср}} = -(eE/m)(t_1/2)$, где множитель $1/2$ обусловлен усреднением за время от начала движения, когда скорость равна нулю, до момента столкновения. Отсюда получаем

$$\sigma = \frac{Ne^2}{m} \frac{t_1}{2}. \quad (1.7)$$

Таким образом, очевидно, что время t_1 просто связано с t_0 , временем, введенным ранее. Иными словами, время, необходимое для того, чтобы скорость стала постоянной, то же, что и время свободного пробега.

Наш простейший вывод формулы (1.7), конечно, слишком груб, чтобы дать точный численный результат. Чтобы улучшить его, следовало бы принять во внимание трехмерный характер движения, а также тот факт, что значения времени свободного пробега не обязаны быть одинаковыми, а могут распределяться статистически. Такие уточнения были сделаны уже Друде и Лорентцем в духе кинетической теории газов. При этом несколько изменился численный коэффициент в формуле (1.7); основная же идея расчета осталась в силе.

Итак, закон Ома вытекает из очень простого приложения идей электронной теории. Удалось получить также и другие результаты. Хорошо известно (экспериментально это было обнаружено Видеманом и Францем), что теплопроводность металлов пропорциональна их электропроводности: хорошие проводники электричества вместе с тем хорошо проводят и тепло. Это легко было бы объяснить, если бы тепло в металлах переносилось

свободными электронами подобно тому, как в газах перенос тепла обусловлен движением молекул. Как видно из формул (1.4) и (1.7), хорошие проводники электричества характеризуются большой концентрацией свободных электронов и большим значением времени свободного пробега. Теплопроводность (при самом простом описании) обусловлена движением частиц из нагретой области вещества в холодную. Эти частицы приносят тепло в холодную область, повышая в ней температуру. Очевидно, чем больше электронов принимает участие в электронной проводимости или чем дольше они «путешествуют», прежде чем остановиться, тем более эффективным будет их влияние на теплопроводность. Пользуясь методами кинетической теории газов, Друде и Лорентц вычислили теплопроводность металла. При этом им удалось установить не только прямую пропорциональность между электропроводностью и теплопроводностью (в соответствии с опытом), но и значение коэффициента пропорциональности, так называемого отношения Видемана — Франца. Последнее оказалось выраженным через универсальные постоянные, причем численное значение хорошо согласовалось с величиной, определенной экспериментально. Очевидно, теория развивалась по правильному пути.

§ 3. Недостатки теории Друде — Лорентца

Итак, мы наметили основные положения теории проводимости металлов по Друде — Лорентцу. Названные авторы применили ее для описания оптических явлений в твердых телах, а также различных термоэлектрических явлений, эффекта Холла и других связанных с ним эффектов. В общем теория казалась вполне удовлетворительной, однако она содержала несколько весьма серьезных недостатков, от которых не удалось избавиться до тех пор, пока в середине 20-х годов к решению задачи не была применена квантовая механика. Прежде всего заметим, что время t_0 по порядку величины близко ко времени свободного пробега. Как уже говорилось выше, последнее можно оценить из опыта. Далее, зная скорость и ускорение электрона из решения уравнений, мы можем определить, как далеко уйдет электрон за время между соударениями, т. е. найти длину его свободного пробега. Когда этот расчет был проделан, выяснилось, что длина свободного пробега слишком велика, чтобы казаться разумной. Из опыта известно, что проводимость значительно увеличивается при низких температурах; это приводит к значительному возрастанию длины свободного пробега. Оказалось, что вполне можно получить значения длин свободного пробега порядка сотен ангстрем. Кажется парадоксальным, однако, что электрон в

металле способен без столкновений пройти путь, значительно превышающий межатомное расстояние (последнее составляет всего несколько ангстрем). Далее из опыта известно, что сопротивление металлов пропорционально абсолютной температуре. Теория Друде — Лорентца не могла убедительно объяснить такое изменение длины свободного пробега, хотя и был предложен ряд частично удовлетворительных объяснений.

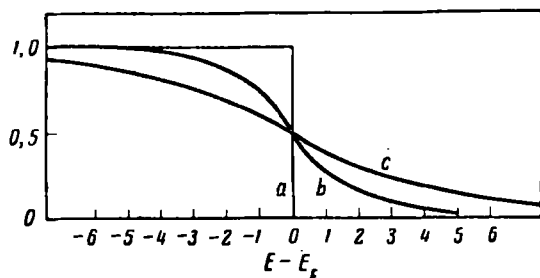
Еще с одной и, возможно, самой серьезной трудностью сталкивается теория Друде — Лорентца при вычислении удельной теплоемкости металла. Если считать, что электроны проводимости ведут себя как свободные частицы, то, согласно классической статистике, средняя энергия каждого из них составляет $\frac{3}{2}kT$, где k — постоянная Больцмана, а T — абсолютная температура. Этот закон равномерного распределения энергии по степеням свободы — один из основных законов классической статистической механики. Тогда, если в единице объема имеется N электронов, то приращение тепловой энергии при изменении температуры на единицу, отнесенное к единице объема (иными словами, удельная теплоемкость единицы объема), будет равно $\frac{3}{2} Nk$. Опыт, однако, не обнаруживает такой удельной теплоемкости свободных электронов. В гл. 7 мы увидим, что Эйнштейн, Дебай, Борн и Карман развили теорию удельной теплоемкости кристаллов, обусловленной колебаниями решетки. Эта теория привела к вполне удовлетворительному согласию с опытом как для диэлектриков, в которых, несомненно, нет свободных электронов, дающих вклад в удельную теплоемкость, так и для металлов. Успех теории, основанной на идее о том, что удельная теплоемкость обусловлена только колебаниями решетки, указывает на отсутствие дополнительной электронной теплоемкости, равной $\frac{3}{2}Nk$. Последний вклад был бы столь велик, что его нельзя было бы не заметить экспериментально. Это — еще одно серьезное затруднение, с которым сталкивается теория Друде — Лорентца. Как и ранее указанные трудности, его удалось устранить только с помощью квантовой механики.

§ 4. Применение статистики Ферми — Дирака к электронам в металле

Трудность с вычислением удельной теплоемкости оставалась одной из фундаментальных проблем теории металлов вплоть до открытия статистики Ферми — Дирака в 1926 г. [6. 7]. Ферми и Дирак, независимо предложившие эту форму статистики, заметили, что принцип запрета Паули приводит к существенному изменению удельной теплоемкости газа. Мы не будем здесь подробно останавливаться на статистике Ферми — Дирака, по-

скольку она излагается в курсах термодинамики и статистической механики¹⁾. Отметим, однако, важнейшие особенности, интересующие нас в связи с применением статистики Ферми — Дирака к электронному газу.

Статистика Ферми — Дирака относится к совокупностям частиц (например, электронов), которые подчиняются принципу Паули, но во всех других отношениях движутся независимо друг от друга. В частности, они могут двигаться и во внешнем поле, хотя в случае свободных электронов такое отсутствует. Рассмотрим распределение электронов по различным возможным



Фиг. 1.1. Функция Ферми $F(E)$, согласно формуле (1.8).

a — при температуре абсолютного нуля; b, c — при более высоких температурах.

энергетическим уровням. Как известно, согласно принципу Паули, каждый уровень может быть занят не более чем одним электроном с заданной ориентацией спина. При температуре абсолютного нуля нижние энергетические уровни вплоть до уровня Ферми целиком заполнены, так что занятых состояний как раз достаточно для размещения всех электронов.

Статистика Ферми — Дирака позволяет обобщить этот результат на случай более высоких температур. Именно при температуре T среднее число электронов с заданной ориентацией спина, находящихся в стационарном состоянии с энергией E , дается выражением

$$F(E) = \frac{1}{[\exp(E - E_F)/kT] + 1}. \quad (1.8)$$

Здесь E_F есть энергия Ферми, подлежащая определению. Вид функции Ферми $F(E)$ показан на фиг. 1.1. Когда энергия E значительно меньше E_F , $F(E)$ приближается к 1; при значении E гораздо большем, чем E_F , функция $F(E)$ стремится к нулю. Как

¹⁾ Элементарное изложение можно найти, например, в книге [8] (см., в частности, гл. V, VI, XXIX). (На русском языке можно рекомендовать монографии [24–27]. — Прим. ред.)

видно из того же графика, переход от одного случая к другому происходит тем быстрее, чем ниже температура. При температуре абсолютного нуля функция $F(E)$ изменяется бесконечно быстро: при всех энергиях, меньших E_F , каждый уровень занят двумя электронами с различными ориентациями спина, в то время как при энергиях, больших E_F , все уровни пусты. Таким образом, энергия E_F соответствует введенному выше уровню Ферми. При температуре абсолютного нуля это есть верхний заполненный уровень энергии.

При произвольной температуре величина E_F определяется из условия, что сумма значений $F(E)$ по всем энергетическим уровням должна быть равна полному числу электронов в системе. Таким образом, зная энергии различных стационарных состояний, мы можем вычислить E_F . Проведем это для газа свободных электронов. Пусть газ заключен в прямоугольный ящик с размерами X, Y, Z вдоль трех координатных осей; для удобства будем использовать периодические граничные условия. Следовательно, компоненты волнового вектора k_x, k_y, k_z , описывающие волновые функции, должны удовлетворять условиям

$$k_x = 2\pi \frac{n_x}{X}, \quad k_y = 2\pi \frac{n_y}{Y}, \quad k_z = 2\pi \frac{n_z}{Z}, \quad (1.9)$$

где n_x, n_y, n_z — целые числа.

Энергия, соответствующая плоской волне, определяется выражением

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}, \quad (1.10)$$

где m — масса электрона. Поверхности постоянной энергии в k -пространстве имеют вид сфер с объемом

$$\frac{4}{3} \pi k^3 = \frac{4}{3} \pi \frac{(2mE)^{3/2}}{\hbar^3}.$$

Согласно (1.9), возможные значения волновых векторов изображаются набором очень близко расположенных точек в k -пространстве. Расстояния между соседними точками в направлениях k_x, k_y, k_z равны соответственно $2\pi/X, 2\pi/Y, 2\pi/Z$. Следовательно, объем k -пространства, связанный с одним дозволенным волновым вектором, составляет

$$\frac{8\pi^3}{XYZ} = \frac{8\pi^3}{V},$$

где $V=XYZ$ — объем газа. Число уровней с энергией меньше E равно объему сферической поверхности энергии в k -пространстве, деленному на $8\pi^3/V$, т. е. на объем, связанный с одним

состоянием. Обозначим через $N(E)$ число состояний с энергией, меньшей E . Получим

$$N(E) = \frac{4}{3} \pi \frac{(2mE)^{3/2}}{\hbar^3} \frac{V}{8\pi^3} = \frac{4}{3} \pi \frac{(2mE)^{3/2}}{\hbar^3} V. \quad (1.11)$$

Формула (1.11) дает число состояний с заданной ориентацией спина. В каждом из них могут находиться два электрона с разными ориентациями спина. Таким образом, если N — число электронов в газе, то энергия Ферми E_F определяется следующим условием:

$$N = \frac{8}{3} \pi \frac{(2mE_F)^{3/2}}{\hbar^3} V, \quad (1.12)$$

$$E_F = \frac{1}{2m} \left(\frac{3N\hbar^3}{8\pi V} \right)^{2/3}.$$

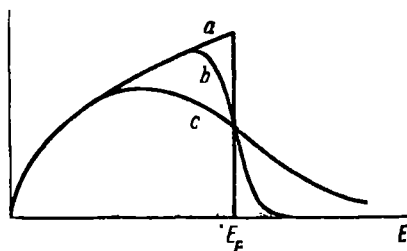
Видно, что энергия Ферми зависит от отношения N/V , т. е. от концентрации электронов, и не зависит от размеров образца.

Часто представляет интерес плотность состояний, т. е. число состояний в интервале между E и $E + dE$. Эту величину легко найти, дифференцируя выражение (1.11) по E . Получаем

$$\frac{dN}{dE} = 2\pi (2m)^{3/2} E^{1/2} \frac{V}{\hbar^3}. \quad (1.13)$$

Это выражение пропорционально корню квадратному из энергии. Оно дает число состояний с заданной ориентацией спина. Число состояний с обеими ориентациями спина вдвое больше.

Теперь, вычислив число состояний в интервале E и $E + dE$, можно найти и число электронов, находящихся в этом энергетическом интервале при любой температуре. Необходимо лишь умножить выражение (1.13) на функцию Ферми и на множитель 2 (чтобы учесть обе ориентации спина). Получающаяся функция для нескольких температур показана на фиг. 1.2. Видно, что при увеличении температуры от абсолютного нуля часть электронов переходит с уровней, лежащих ниже E_F , в область более высоких энергий. Легко вычислить результирующее изменение энергии и, следовательно, вклад свободных электронов в удельную теплоемкость, согласно статистике Ферми — Дирака.



Фиг. 1.2. Энергетическая зависимость числа занятых уровней в газе свободных электронов.

a — при температуре абсолютного нуля;
 b, c — при более высоких значениях температуры.

Действительно, как следует из (1.8), интервал энергий, выше которого функция Ферми $F(E)$ спадает примерно от 1 до $1/2$ (т. е. до своего значения при $E = E_F$), пропорционален температуре. Следовательно, число электронов, которые при изменении температуры от абсолютного нуля до T перебрасываются с низших уровней на более высокие, будет пропорционально kT и плотности состояний dN/dE на уровне Ферми. Энергия каждого из этих электронов увеличивается на величину, пропорциональную kT . Таким образом, разность между энергией электронов при температуре T и при абсолютном нуле равна

$$\text{const} \times (kT)^2 \frac{dN}{dE} \Big|_{E=E_F} \quad (1.14)$$

Удельная теплоемкость получается отсюда дифференцированием по температуре; следовательно, она пропорциональна $k^2 T dN/dE$. Путем более подробного расчета можно найти и точное значение этой величины. Мы имеем¹⁾

$$\text{Удельная теплоемкость} = \frac{\pi^2}{2} k^2 T \frac{N}{E_F}. \quad (1.15)$$

Очевидно, что это выражение имеет вид (1.14), так как для газа свободных электронов плотность состояний на уровне Ферми dN/dE пропорциональна N/E_F .

Итак, из статистики Ферми — Дирака следует, что удельная теплоемкость электронов при низких температурах пропорциональна абсолютной температуре, а не остается постоянной, как в классической статистике. Сравнивая формулу (1.15) с выражением для удельной теплоемкости классического газа $3/2 Nk$, можно найти отношение этих двух величин при низких температурах. Получим

$$\frac{C_{\text{(Ферми — Дирака)}}}{C_{\text{(Максвелла — Больцмана)}}} = \frac{\pi^2}{3} \frac{kT}{E_F}. \quad (1.16)$$

Иными словами, до тех пор пока величина kT мала по сравнению с энергией Ферми E_F (а именно так обстоит дело при всех обычных температурах), удельная теплоемкость электронов, согласно статистике Ферми — Дирака, будет гораздо меньше своего классического значения. Таким образом, видно, что статистика Ферми устраняет трудность, характерную для теории ДрUDE — Лорентца.

Хотя удельная теплоемкость электронов, согласно теории Ферми — Дирака, мала, наблюдать ее все же можно. Дело в

¹⁾ См. [8], гл. 5.

том, что при очень низких температурах удельная теплоемкость, связанная с решеткой, пропорциональна T^3 . В то же время удельная теплоемкость электронов, как мы только что видели, пропорциональна T . В области очень низких температур, хотя электронная удельная теплоемкость и мала, но решеточная — еще меньше, и тщательно проведенные измерения позволяют определить значения электронной удельной теплоемкости. В таком случае можно воспользоваться выражениями (1.14) или (1.15). В частности, согласно первому из них, удельная электронная теплоемкость пропорциональна плотности состояний на уровне Ферми. Можно доказать, что так же обстоит дело и для электронов в периодическом поле. Как показано в т. 2, гл. 10, плотность состояний становится очень большой для переходных элементов, таких, как железо, кобальт и никель. Соответственно следует ожидать, что у этих элементов удельная теплоемкость электронов будет особенно велика. Установлению связи электронной теплоемкости с плотностью состояний было посвящено множество работ; в общем экспериментальные данные хорошо согласуются с вычисленными значениями плотностей состояний.

Первые серьезные работы по приложению статистики Ферми — Дирака к актуальным проблемам электронной теории металлов были выполнены Зоммерфельдом и его сотрудниками в 1928 г. [9]. Названные авторы исследовали задачу об электронной теплоемкости (их результаты изложены выше в этой главе), после чего перешли к проблемам электронной проводимости, термоионной эмиссии и другим вопросам¹⁾.

§ 5. Рассеяние электронов и электрическое сопротивление

В предыдущей главе мы видели, как применение методов квантовой механики (в форме статистики Ферми — Дирака) позволило решить одну из проблем теории Друде — Лорентца: удалось объяснить малую величину удельной теплоемкости электронов. Сейчас мы перейдем к другой трудности, связанной с механизмом электрического сопротивления. Напомним, что здесь оставались две загадки: почему длина свободного пробега электрона столь велика и почему сопротивление металла увеличивается пропорционально температуре. Решение было дано в 1928 г. в работах Хаустона, Блоха, Френкеля и Мирулобова [11–14]. Эти авторы использовали представления, развитые за

1) Следует обратить внимание также на работу [28]. — *Прим. ред.*

несколько лет до того Дебаем и Бриллюэном [15–17] в связи с задачей о рассеянии света в кристаллах. Задача состояла в исследовании механизма, с помощью которого электрон, проходя через кристалл, постепенно теряет свою начальную скорость [как это отражено в решении (1.5) с учетом затухания]. Рассматривая этот процесс экспоненциального затухания первоначальной скорости частицы, мы можем отдельно изучить две стороны задачи об электропроводности: ускорение, вызванное электрическим полем, и затухание.

Прежде всего отметим, что решение задачи об электроне в периодическом поле (см. т. 2 этой серии) не оставляет места для затухания: в периодическом поле механизмов затухания не больше, чем в пустом пространстве¹⁾. Хотя электрон и перемещается от атома к атому, условия периодичности задачи таковы, что решения имеют вид правильных незатухающих электронных волн. Это следует из квантовой механики, согласно которой электроны могут проходить много атомных расстояний, не встречая препятствий. Тем самым устраняется еще одно затруднение теории Друде — Лорентца, в рамках которой трудно было понять, как электрон может пройти хотя бы одно межатомное расстояние, не испытав столкновения; вместе с тем столь малая длина свободного пробега привела бы к очень заниженному значению проводимости.

Согласно квантовой механике, чтобы получить затухание электронной волны, необходимо учитывать не только периодическое поле. И действительно, вскоре мы убедимся в том, что почти любое нарушение периодичности решетки вызывает затухание волны. Иначе говоря, нужно исследовать рассеяние электронных волн нерегулярностями решетки. Задача о рассеянии известна из оптики. Известно, что когда плоская световая волна входит в рассеивающую среду, скажем газ или жидкость, составляющие ее элементарные волны будут рассеиваться на каждом центре (например, молекуле или частице пыли); эти рассеянные волны будут забирать часть интенсивности падающей волны. Рассеяние приводит к распространению волны во всех направлениях от рассеивающего центра. Рассеянные волны вновь будут рассеиваться; в конце концов это многократное рассеяние приведет к равномерному распространению света во всех направлениях. Нечто подобное наблюдается в атмосфере: голубой цвет неба обусловлен рассеянием света (голубой потому, что короткие волны рассеиваются сильнее, чем длинные). Этот свет приходит к нам со всех направлений, поскольку он рассеивается в различных точках атмосферы. В ясный день мы все же видим солнце, хотя и

¹⁾ См. [21, 22, 23]. — *Прим. ред.*

не так отчетливо, как в случае, если бы рассеяния не было; доля рассеянного солнечного света на его пути к нам в ясный день не слишком велика. В туманный день, однако, рассеяние оказывается более сильным, и мы совсем не видим солнца, но со всех направлений до нас доходит большое количество рассеянного света. Все это может происходить без какого бы то ни было поглощения. Последним термином мы обозначаем потери свега за счет изменения длины волны или ее характера, которое приводит в конце концов к переходу энергии в тепло. При рассеянии же потерь света не происходит; он лишь распространяется в другом направлении.

Таким же образом может рассеиваться и электронная волна. В результате плоская волна, характеризующаяся определенным значением импульса, может превратиться в волну, распространяющуюся во всех направлениях и потому вообще не обладающую импульсом. Это рассеяние, очевидно, приводит к потерям суммарного тока, текущего в материале; хаотическое движение рассеянной волны может привести к беспорядочным токам, но не к какому-либо конечному среднему току. Для описания такого явления можно использовать либо среднее время рассеяния, либо силу сопротивления, либо подвижность. Действительно, электрон, проходя через рассеивающую среду, постепенно теряет свой первоначальный импульс вследствие рассеяния; это эквивалентно силе сопротивления. Существует даже аналогия между прохождением электронной волны через идеально периодический кристалл и несколько сходным явлением в случае света. Световая волна проходит через идеальный кристалл без рассеяния, даже если он содержит великое множество атомов, каждый из которых сам по себе вызывает рассеяние элементарных волн. Тщательное исследование оптической задачи показывает, что при идеально периодическом расположении атомов все эти волны гасятся в результате интерференции и не дают результирующей рассеянной волны. При этом происходит лишь преломление, т. е. изменение фазовой скорости волны при прохождении ее через среду. Так обстоит дело даже тогда, когда длина волны сравнима с межатомным расстоянием (что имеет место для рентгеновских лучей). Единственное исключение составляет случай, когда волна удовлетворяет условию брэгговского отражения. Только тогда волны, рассеянные разными атомами, интерферируют, усиливаясь, и дают рассеянный пучок. То же самое происходит и с электронными волнами. Эта задача более подробно рассматривается в гл. 6 и 7.

В отличие от прозрачного твердого тела газ или жидкость рассеивают свет. Это обусловлено тем, что в газе или в жидкости имеются флуктуации плотности, которых нет в твердых

телах и которые приводят к неполному гашению интерферирующих рассеянных волн. Теория показывает, что для рассеяния существенны флуктуации показателя преломления. Последние могут быть вызваны в первую очередь примесями, распределенными по материалу. Они могут вызываться также флуктуациями плотности, возникающими вследствие разности давлений. В частности, плоская звуковая волна, проходя через жидкость, вызывает рассеяние определенного типа, иногда называемое эффектом Дебая — Сирса [18, 19]. Вследствие прохождения звука возникают периодически расположенные плоскости сжатия и разрежения; они приводят к флуктуациям показателя преломления, зависящего от плотности. В отличие от случайных флуктуаций изменения плотности в звуковой волне расположены регулярно, в результате чего рассеянные волны могут интерферировать правильным образом. Задача о вычислении результата интерференции здесь сводится к тем же вычислениям, что и в теории дифракции рентгеновских лучей, когда рассеяние обусловлено изменениями плотности в различных плоскостях кристалла. Оказалось, что и в случае Дебая — Сирса отражение от плоскостей сжатия и разрежения подчиняется закону Брэгга, но с небольшой модификацией. Дело в том, что звуковая волна движется. Поэтому рассматриваемое явление аналогично отражению от движущегося зеркала, что приводит к эффекту Доплера в отраженном свете, т. е. к небольшому изменению частоты последнего. Это обстоятельство составляет одну из характерных особенностей эффекта Дебая — Сирса.

Мы уделили здесь так много внимания эффекту Дебая — Сирса, поскольку он тесно связан с рассеянием света или рентгеновских лучей тепловыми колебаниями решетки. Именно последний эффект рассматривался Бриллюэном в упомянутой выше работе; обычно его называют бриллюэновским рассеянием. В гл. 7 мы увидим, что тепловые колебания можно рассматривать как суперпозицию плоских волн акустического типа, длины которых принимают все значения вплоть до некоторого предельного, по порядку величины близкого к межатомному расстоянию. Следовательно, рассеяние света тепловыми колебаниями можно рассматривать как рассеяние на различных плоских волнах, каждая из которых ведет себя как в эффекте Дебая — Сирса. Таким путем можно описывать даже рассеяние рентгеновских лучей, поскольку самые короткие ультразвуковые волны достаточно коротки, чтобы рассеивать рентгеновские лучи по закону Брэгга. Как будет показано в гл. 7 § 4, таким путем можно построить по существу полную теорию рассеяния света и рентгеновских лучей на флуктуациях плотности, связанных с тепловыми колебаниями решетки. Окончательные результаты, однако,

не очень отличаются от тех, которые получаются при рассмотрении простейшего случая — независимого рассеяния отдельными атомами, совершающими тепловые колебания. Эта простая картина также приводит к довольно ясному пониманию данного аспекта рассеяния.

Отметим одну из особенностей процесса рассеяния, к которой очень просто приводит трактовка Бриллюэна или Дебая — Сирса. Речь идет об изменении частоты рассеянного света, обусловленном, как мы уже видели, эффектом Доплера. В области рентгеновских лучей это изменение частоты известно также под названием эффекта Комптона¹⁾). Обычно этот эффект описывается на корпускулярном, а не на волновом языке. Фотон, сталкиваясь с атомом и испытывая рассеяние, обладает некоторым импульсом. В процессе рассеяния выполняется закон сохранения импульса. Пусть фотон при столкновении меняет направление своего движения, попадая в рассеянный пучок. Тогда разность между начальным и конечным значениями его импульса должна быть передана атому. Последний, таким образом, должен получить некоторый импульс, а с ним и скорость и кинетическую энергию. Иначе говоря, атом, первоначально находившийся в состоянии покоя, после столкновения должен начать двигаться. Закон сохранения энергии требует, чтобы фотон потерял энергию, передаваемую атому; поскольку его энергия равна $h\nu$, отсюда следует, что в процессе рассеяния частота света должна уменьшаться. Это и есть эффект Комптона. Квантовомеханическая теория эффекта, о которой говорилось выше, оперирует с рассеянием света ультразвуковыми волнами и с эффектом Доплера, обусловленным их движением со скоростью звука. Две картины — корпускулярная и волновая — приводят к идентичным результатам.

Мы столь подробно углубились в описание процесса рассеяния света главным образом для того, чтобы показать, что рассеяние электронных волн не вносит в задачу ничего принципиально нового. Причину этого рассеяния легко найти, замечая, что любое нарушение периодичности решетки, вызванное либо примесными атомами, либо тепловыми колебаниями, приводит к изменению потенциальной энергии электронов. Это означает,

1) Ссылки на библиографию по эффекту Комптона см. в конце главы. Мы отложим до другого тома изучение довольно обширного круга вопросов, посвященных комптоновскому рассеянию на электронах, связанных в атоме. Этот эффект сильно влияет на рассеяние индивидуальным атомом, а также дает ценную информацию о распределении атомных электронов по импульсам. Подобные исследования связаны с именами Дю Монда, Данкенсона и других авторов, не включенных в библиографию настоящего тома. В ней, однако, указаны статья Фримена [2115—2121], посвященные в основном изучению атомных формфакторов; они относятся также и к комптоновскому рассеянию.

что мы будем иметь потенциальную энергию возмущения $V_1(x, y, z)$, изменяющуюся от точки к точке. Задачу о рассеянии электронов при этом можно рассматривать с помощью уравнения Шредингера для электрона в суммарном поле, создаваемом идеальной решеткой и возмущением. В следующей главе и в приложении I мы покажем, как рассматривается влияние такого возмущения на движение волнового пакета. Можно пойти и дальше и рассмотреть влияние возмущения указанного типа на индивидуальные волновые функции; при этом оказывается, что они действительно рассеиваются — во многом так же, как световые волны. Как и в случае света, исследуем рассеяние электронов примесными атомами и тепловыми колебаниями решетки. Последнее можно рассматривать по аналогии с бриллюэновским рассеянием или эффектом Дебая — Сирса, т. е. как рассеяние либо различными ультразвуковыми волнами, либо отдельными колеблющимися атомами. Атом, сместившийся из своего положения равновесия за счет тепловых колебаний, рассматривается при этом как нечто вроде атома примеси.

Эта картина рассеяния на атомах, испытывающих тепловые колебания, естественно приводит к одному важному результату (который можно подтвердить и более тщательным анализом), а именно следует ожидать, что амплитуда рассеянной волны будет пропорциональна смещению рассеивающего атома из положения равновесия. Соответственно интенсивность волны, пропорциональная квадрату амплитуды, окажется пропорциональной квадрату смещения атома. Но интенсивность волны определяет вероятность рассеяния частицы. Далее, в области температур, достаточно высоких, чтобы выполнялся принцип равномерного распределения энергии по степеням свободы, квадрат смещения атома, пропорциональный энергии колебаний, будет, следовательно, пропорционален и температуре. Итак, можно ожидать, что вероятность рассеяния электрона на тепловых колебаниях решетки должна быть пропорциональна абсолютной температуре. Это и приводит к наблюдаемой на опыте пропорциональной зависимости между абсолютной температурой и сопротивлением образца. При низких температурах, когда равномерное распределение энергии уже не имеет места, амплитуда колебаний атомов оказывается меньшей, чем можно было бы ожидать согласно классической статистике. Соответственно и интенсивность рассеяния электронных волн должна уменьшаться с температурой быстрее, чем это предписывается прямой пропорциональной зависимостью. Более точный расчет действительно приводит к такому результату.

Как и следовало ожидать, точная теория рассеяния электронов тепловыми колебаниями решетки основана на представле-

нии о плоских ультразвуковых волнах, рассеивающих электроны в соответствии с эффектом Бриллюэна. При этом выявляется одна особенность, существенная для общей картины: как и в эффекте Комптона, кинетическая энергия электрона слегка уменьшается при рассеянии его плоской ультразвуковой волной. Иначе говоря, электрон отдает решетке некоторую небольшую часть своей энергии. Конечно, этого и следовало ожидать от любой адекватной теории электрического сопротивления. Действительно, электрическое поле, приложенное к электронам и ускоряющее их, действует постоянно. Импульс электронов рассеивается при столкновениях с атомами. Однако если бы при этом не рассеивалась приобретаемая электронами кинетическая энергия, то имел бы место непрерывный рост энергии беспорядочного движения электронов. Рассмотренный выше эффект отдачи, подобный эффекту Комптона, обеспечивает механизм обмена энергией между электронами и решеткой, в результате которого между ними и устанавливается тепловое равновесие. Как известно, при непрерывном действии на проводник электрического поля совершаемая им работа проявляется в виде джоулева тепла, увеличивающего температуру проводника. При равновесии это увеличение внутренней энергии должно, разумеется, распределяться между атомами и электронами. Однако, как мы уже видели, удельная теплоемкость электронов очень мала по сравнению с удельной теплоемкостью решетки. Следует ожидать поэтому, что почти все джоулево тепло проявится в виде энергии атомов. Описанный выше механизм позволяет быстро передать атомам энергию, которая первоначально была передана полем непосредственно электронам.

Итак, мы видим, что электронные волны могут испытывать рассеяние на любых нарушениях решетки, включая и тепловые колебания. Этим и обеспечиваются конечные значения времени и длины свободного пробега или подвижности. Заметим, что в то время как рассеяние на тепловых колебаниях при высоких температурах пропорционально температуре, рассеяние на других нарушениях почти не зависит от температуры. В качестве примера этих «других нарушений» можно упомянуть не только примеси (что очевидно), но и дефекты решетки, возникающие при холодной обработке, а также любые другие искажения в кристалле. Очевидно далее, что в сплавах будут иметь место нарушения периодичности, связанные с более или менее беспорядочным расположением атомов разных сортов. Это также приведет к рассеянию электронов. Мы можем теперь получить несколько простых результатов относительно проводимости металла, пользуясь простыми формулами (1.4)—(1.7). В металле число свободных электронов N практически не зависит от температуры.

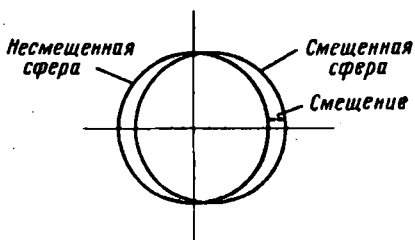
В отсутствие примесей или иных дефектов решетки, когда все рассеяние обусловлено тепловыми колебаниями, вероятность рассеяния, описываемую слагаемым $-mg dx/dt$ в уравнении (1.1), можно считать пропорциональной температуре. Тогда проводимость будет обратно пропорциональна, а сопротивление прямо пропорционально температуре, что, как известно, и имеет место. С другой стороны, если существует дополнительное рассеяние на дефектах решетки, то в уравнении (1.1) появятся дополнительные члены. В результате коэффициент g будет представлять собой сумму двух членов, один из которых пропорционален температуре, а другой не зависит от нее. Соответственно и удельное сопротивление будет равно сумме двух членов, один из которых пропорционален температуре, а другой от нее не зависит. Последний обычно называют остаточным членом, поскольку он отличен от нуля и при абсолютном нуле температуры. Эта приближенная аддитивность теплового и остаточного сопротивлений наблюдается на опыте; она известна под названием правила Маттисена. Из опыта известно, что остаточное сопротивление обусловлено холодной обработкой, наличием примесей или образованием сплавов. Отметим, что при достаточно низких температурах термический член в сопротивлении уже не будет прямо пропорционален температуре: фактически он оказывается гораздо меньше. Более точная теория [10] показывает, что при низких температурах этот член меняется как пятая степень температуры.

§ 6. Статистика Ферми и проводимость металлов

Рассуждения, изложенные в предыдущем параграфе, кажутся очень простыми. Однако мы совершенно забыли при этом, что в силу статистики Ферми электроны в металле заполняют зону проводимости вплоть до высоты в несколько электронвольт и подчиняются принципу Паули. По этой причине предположение о полной потере скорости после каждого столкновения абсолютно неправильно. Это не может произойти, поскольку энергетический уровень, связанный с нулевой кинетической энергией, уже заполнен. Можно ожидать, таким образом, что принцип Паули будет существенно сказываться на проводимости; до сих пор мы полностью упускали из виду это обстоятельство, к которому теперь следует перейти. Действительно, мы увидим, что указанный эффект весьма важен, однако он проявляется таким образом, что сформулированные выше результаты относительно проводимости, эффектов рассеяния и т. д. по существу остаются в силе. Именно по этой причине оказалось возможным в течение длительного времени без особых затруднений пользоваться классической теорией Друде — Лорентца.

Пусть в начальный момент времени электроны находятся в равновесии. Тогда они будут заполнять все уровни ниже уровня Ферми; вблизи последнего плотность электронов будет быстро уменьшаться от максимума (два электрона на уровень) до нуля. На фиг. 1.3 изображена эта картина в импульсном пространстве. Начертим энергетические контуры (линии постоянной энергии) в p -пространстве (или соответственно в k -пространстве); в частности, отметим линию, отвечающую энергии Ферми. Для свободных электронов эта линия соответствует сфере (или кругу в двумерном случае). Посмотрим теперь, что произойдет при наложении электрического поля. Пусть оно направлено вдоль оси x , тогда точки, изображающие импульсы электронов, будут двигаться вдоль оси x , как показано на схеме. Это будет соответствовать возникновению тока, который, как и скорости электронов, будет возрастать пропорционально времени (в отсутствие члена, характеризующего затухание в уравнении движения). Однако этот рост не бесконечен вследствие рассеяния электронных волн нерегулярностями решетки.

Для простоты допустим, что электрон свободно движется в течение времени t_1 , после чего испытывает рассеяние. На фиг. 1.3 показано сдвинутое распределение занятых уровней по истечении времени t_1 . Посмотрим теперь, какие могут быть столкновения. Учет требований статистики Ферми в кинетике очень прост: мы вычисляем вероятность электронного перехода так, как если бы никаких статистических ограничений не было, а затем запрещаем все переходы в состояния, уже занятые электронами. Согласно квантовой механике, без учета статистики Ферми в процессе рассеяния изменялся бы импульс электрона и в очень малой мере — его энергия (как мы видели, изменение энергии обусловлено только эффектом отдачи атомов). Иными словами, импульс электронов меняется от своего первоначального значения до некоторого другого, соответствующего очень слабо уменьшенному значению энергии. Это означает, что на фиг. 1.3 изображающие точки в пространстве импульсов растекутся примерно по поверхности сферы. Теперь видно, что если импульс рассматриваемой волны соответствует энергии значительно ниже энергии Ферми, то рассеяние окажется вообще



Фиг. 1.3. Несмещенная сфера — поверхность Ферми газа свободных электронов; сфера сдвинута вдоль направления внешнего поля за счет силы, действующей в течение времени t_1 .

невозможным вследствие принципа Паули. Действительно, все уровни, в которые рассеяние могло бы происходить, уже заполнены, и вероятность рассеяния равна нулю. Незанятые состояния, в которые электрон сможет перейти, найдутся только в том случае, если начальная его энергия очень близка к уровню Ферми. Только в этом случае волна и будет рассеиваться. С другой стороны, раз уж электрон попал на вершину распределения Ферми, вероятность его рассеяния там будет почти такой же, как и без учета принципа Паули. В самом деле, здесь вероятность того, что уровень, в который могло бы произойти рассеяние, окажется занятым, очень мала.

Итак, мы приходим к следующей картине рассеяния. Под действием приложенного электрического поля точки, изображающие состояние электронов, равномерно движутся в импульсном пространстве в направлении внешней силы. Это движение не нарушается рассеянием, пока вся процессия не дойдет до уровня Ферми (или, может быть, чуть выше). Тогда появится возможность рассеяния, которое и произойдет спустя время порядка t_1 . Изображающая точка после рассеяния окажется где-то вблизи границы занятой области, грубо говоря, на поверхности Ферми. Это приведет к равновесной ситуации: распределение достигнет стационарного состояния, когда оно смещено как целое на расстояние, проходимое за время порядка t_1 . Это, однако, по существу эквивалентно ситуации, с которой мы уже встречались в классической статистике. За время t_1 скорости всех электронов увеличатся на одну и ту же величину, и задача об определении проводимости сведется точно к уравнению (1.7). Тем самым оправдывается сделанное выше утверждение: хотя фактическая ситуация сильно отличается от той, которая имела бы место в отсутствие статистики Ферми и принципа Паули, окончательный результат в части, касающейся проводимости, оказывается прежним.

Во всех рассуждениях этой главы было сделано несколько далеко идущих и неоправданных предположений. Во-первых, мы рассматривали электроны в реальном металле как свободные. Вместе с тем из т. 2 известно¹⁾, что истинные волновые функции и энергии сильно отличаются от таковых для свободных электронов. Очевидно, решая задачу об электропроводности вещества, необходимо принять во внимание зонную структуру его энергетического спектра. Можно ожидать, что, следуя этим путем, мы найдем подтверждение изложенных выше представлений о причинах различия между металлами, полупроводниками и диэлектриками. Во-вторых, ускорение электронов рассматривалось в

¹⁾ См. примечание на стр. 13. — *Прим. ред.*

рамках классической механики. Очевидно, это незаконно: необходимо выяснить, как обстоит дело в квантовой механике. При этом принцип неопределенности не позволяет рассматривать импульс как точно определенную величину (как мы это делали). Вместо этого следует ввести волновые пакеты должной величины и посмотреть, как они ускоряются во внешнем поле. Эти важные вопросы, касающиеся квантовомеханической интерпретации проводимости, будут в первую очередь рассмотрены в следующей главе. Затем мы сможем перейти к исследованию проводимости различных типов твердых тел.

ЛИТЕРАТУРА ¹⁾

1. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 2, New York, 1965.
2. Voigt W., Lehrbuch der Kristallphysik, Stuttgart, Leipzig, Berlin, 1910.
3. Drude P., Ann. Phys., 1, 566 (1900); 3, 369 (1900).
4. Lorentz H. A., Proc. Amsterdam Acad., 438, 588, 684 (1904—1905).
5. Lorentz H. A., The Theory of Electrons, 1st ed., Stuttgart, Leipzig, Berlin, 1909. (См. перевод: Г. Лорентц, Теория электронов, М.—Л., 1934.)
6. Fermi E., Zs. Phys., 36, 902 (1926).
7. Dirac P. A. M., Proc. Roy. Soc., A112, 661 (1926).
8. Slater J. C., Introduction to Chemical Physics, New York, 1939.
9. Sommerfeld A., Zs. Phys., 47, 1, 43 (1928).
10. Eckart C., Zs. Phys., 47, 38 (1928).
11. Houston W. V., Zs. Phys., 47, 33 (1928); 48, 449 (1928).
12. Houston W. V., Phys. Rev., 34, 279 (1929).
13. Bloch F., Zs. Phys., 52, 555 (1928).
14. Френкель Я., Мирулюбов Н., Zs. Phys., 49, 885 (1928)
15. Debye P., Ann. Phys., 43, 49 (1914).
16. Brillouin L., Compt. Rend., 158, 1331 (1914).
17. Brillouin L., Ann. de Phys., 17, 88 (1922).
18. Debye P., Sears F. W., Proc. Natl. Acad. Sci. US., 18, 409 (1932).
19. Debye P., Zs. Phys., 33, 849 (1932).
20. Bloch F., Zs. Phys., 59, 208 (1930).
- 21* Киттель Ч., Квантовая теория твердых тел, изд-во «Наука», 1967.
- 22* Пайерлс Р., Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956.
- 23* Джонс Г., Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах, изд-во «Мир», 1968.
- 24* Леонтович М. А., Статистическая физика, М.—Л., 1944.
- 25* Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, 2-е изд., изд-во «Наука», 1964.
- 26* Левиц В. Г., Введение в статистическую физику, М., 1950.
- 27* Самойлович А. Г., Термодинамика и статистическая физика, 2-е изд., М., 1955.
- 28* Френкель Я. И., Zs. Phys., 47, 819 (1928).
- 29* Соколов А. А., Лоскутов Ю. М., Тернов И. М., Квантовая механика, 2-е изд., изд-во «Просвещение», 1965.

¹⁾ Литература, отмеченная звездочкой, добавлена редактором перевода.

Глава 2

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ

§ 1. Электрон в периодическом поле решетки и внешнем электрическом поле

Мы переходим теперь к задаче об электропроводности кристалла, электроны которого движутся не свободно, а в периодическом поле решетки. Первая математическая задача, которая здесь возникает, состоит в выяснении влияния внешнего электрического поля на движение электронов в периодическом поле. Примем во внимание также и наличие постоянного внешнего магнитного поля, поскольку изучение электропроводности в этих условиях дает весьма существенные результаты для зонной теории. Существуют две важные теоремы относительно движения электрона во внешнем поле и периодическом поле решетки. Строгое доказательство их несколько сложно, однако суть дела можно понять с помощью рассуждений, которые при более подробном рассмотрении оказываются и в самом деле законными. Эти рассуждения вместе с формулировкой теоремы приводятся в настоящей главе; более строгие доказательства даны в приложении 1.

Теоремы относятся к движению волнового пакета. В квантовой механике принцип неопределенности не позволяет изучать ускорение отдельного электрона. Лучшее, что можно сделать, — это ввести волновой пакет. Посмотрим сначала, какие волновые пакеты можно было бы ввести, желая описать ситуацию, в которой электрон в n -й энергетической зоне приближенно характеризуется как волновым вектором \mathbf{k} , так и некоторыми пространственными координатами. По условию импульс $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ должен быть хорошо определен. Иначе говоря, надо составить линейную комбинацию функций Блоха так, чтобы отвечающие им значения приведенного волнового вектора были локализованы в малой доле зоны Бриллюэна вблизи заданной точки \mathbf{k} . Пусть размеры соответствующей области пространства импульсов будут порядка Δp_x , Δp_y , Δp_z . Тогда, согласно принципу неопределенности Гейзенберга, размеры пакета в координатном пространстве будут порядка Δx , Δy , Δz , где

$$\Delta p_x \Delta x = h, \quad \Delta p_y \Delta y = h, \quad \Delta p_z \Delta z = h; \quad (2.1)$$

эти соотношения можно переписать в виде

$$\Delta k_x \Delta x = 2\pi \text{ и т. д.}$$

Далее, линейный размер всей зоны Бриллюэна k_x по порядку величины составляет $2\pi/a$, где a есть один из базисных векторов решетки; для кубической решетки это значение точное. Итак, условие малого значения величины Δk_x по сравнению с размерами зоны Бриллюэна означает, что величина Δk_x должна быть мала по сравнению с $2\pi/a$. При этом, согласно (2.1), величина Δx должна значительно превышать a , т. е. волновой пакет должен быть велик по сравнению с элементарной ячейкой кристалла. Это, однако, не должно нас смущать, поскольку размеры волнового пакета малы по сравнению с длинами, на которых заметно изменяются интересующие нас возмущающие поля. Последние длины обычно бывают макроскопическими; в частности, эта ситуация типична для внешних электрического и магнитного полей в твердом теле. Поэтому волновые пакеты, о которых мы говорили, будут эффективно малы, даже если они охватывают значительное число элементарных ячеек.

Пользуясь принципом неопределенности в таком виде, мы должны помнить, что вектор k , характеризующий функции Блоха, или связанная с ним величина с размерностью импульса $p = \hbar k$ фактически не является истинным импульсом электрона. Как известно, функция Блоха представляет собой суперпозицию бесконечного числа плоских волн, соответствующих всем волновым векторам $k + K_i$, где K_i — волновой вектор обратной решетки. Средний импульс электрона в таком состоянии получается из средних, отвечающих всем этим плоским волнам, и он отнюдь не равен $\hbar k$. Аналогично пусть волновой пакет образован из функций Блоха, отвечающих приблизительно одному и тому же значению k . Тогда средний импульс пакета будет примерно тем же, что и у составляющих его функций Блоха. Именно этот средний импульс и связанную с ним среднюю скорость волнового пакета (равную отношению среднего импульса к массе) мы и будем рассматривать в следующем параграфе. Чтобы отличать величину $p = \hbar k$ от истинного импульса, ее принято называть квазиимпульсом. Именно с квазиимпульсом мы и имеем дело, рассматривая размеры волновых пакетов. Причина, по которой мы получили правильный результат, заключается в следующем. Волновой пакет составляется из волн примерно одинаковой длины, причем внутри пакета они интерферируют, усиливаясь, а вне его — ослабляясь. Длины блоховских волн связаны с волновым вектором k соотношением де Бройля, и это все, что требуется для вывода соотношений неопределенности.

Обратимся теперь к первой из двух упомянутых выше теорем. Она относится к средней скорости волнового пакета в периодическом поле. Как уже говорилось, эта скорость выражается обычно не через квазиимпульсы p , а через средний (в квантовомеханическом смысле) импульс электрона. Можно было бы ожидать также, что средняя скорость окажется не чем иным, как групповой скоростью блоховских волн. И это действительно так. Напомним [7]¹⁾, что стандартная формула для групповой скорости имеет вид

$$v_{gx} = \frac{\partial H}{\partial p_x}, \quad v_{gy} = \frac{\partial H}{\partial p_y}, \quad v_{gz} = \frac{\partial H}{\partial p_z}. \quad (2.2)$$

Здесь p_x, p_y, p_z — «импульсы», связанные с длинами волн соотношением де Бройля, т. е. в данном случае это компоненты квазиимпульса, а не истинного среднего импульса волнового пакета. Следовательно, если энергия в n -й энергетической зоне есть некоторая функция волнового вектора $E_n(k)$, то следует ожидать, что

$$v_{gx} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_x}, \quad v_{gy} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_y}, \quad v_{gz} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_z}. \quad (2.3)$$

Эти соотношения действительно оказываются правильными. В приложении 1 вычислено среднее значение оператора скорости в состоянии, описываемом функцией Блоха или волновым пакетом. (Это среднее, конечно, равно среднему значению оператора импульса, деленному на массу электрона.) Результат точно совпадает с формулами (2.3). Доказательство сводится к непосредственной выкладке и никак не связано с представлением о групповой скорости.

При наличии только периодического поля волновой пакет, подобно свободно движущейся частице классической механики, бесконечно долго сохраняет постоянные значения квазиимпульса, энергии и скорости. Нам, однако, нужно знать, что происходит с волновым пакетом под действием дополнительного возмущения, связанного с внешним электрическим или магнитным полем; именно так обстоит дело в обычном опыте по измерению проводимости в присутствии магнитного поля. Пусть имеется возмущение, описываемое потенциальной энергией V_1 , слабо зависящей от координат; пусть также имеется и не зависящий от времени вектор-потенциал \mathbf{A} , связанный с магнитной индукцией соотношением $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$. Обозначим суммарную силу, действующую на электрон со стороны электрического и магнитного полей, через \mathbf{F} . Тогда

$$\dot{\mathbf{F}} = -e [\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})]. \quad (2.4)$$

¹⁾ См. также [8].

Здесь, как и раньше, $-e$ — заряд электрона, \mathbf{E} — напряженность электрического поля (равная $-\text{grad } V_1$), \mathbf{v} — скорость волнового пакета, определяемая равенствами (2.3), и \mathbf{B} — магнитная индукция. Тогда, согласно второй теореме, доказываемой в приложении 1,

$$\frac{dp_x}{dt} = F_x, \quad \frac{dp_y}{dt} = F_y, \quad \frac{dp_z}{dt} = F_z, \quad (2.5)$$

т. е. скорость изменения квазиимпульса $\hbar\mathbf{k}$ задается возмущающей силой. Соотношения (2.5) выглядят как второй закон Ньютона, но, конечно, они ему не эквивалентны. Действительно, во-первых, здесь мы имеем дело не с истинным импульсом, а с квазиимпульсом; во-вторых, в выражение для силы, действующей на волновой пакет, не включена сила, связанная с периодическим полем (самая большая по величине).

Хотя уравнения (2.5) и не идентичны второму закону Ньютона, в правильности их (по крайней мере в отсутствие магнитного поля) можно убедиться с помощью простых соображений, основанных на законе сохранения энергии. Именно в отсутствие магнитного поля полная энергия волнового пакета складывается из энергии в энергетической зоне в отсутствие возмущения (E_n) и потенциальной энергии возмущения в данной точке (V_1). В силу закона сохранения энергии энергии волновой пакет должен двигаться так, чтобы сумма $E_n + V_1$ оставалась постоянной. Но именно это и обеспечивается равенствами (2.3)—(2.5). Действительно, их можно переписать в виде

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_x}, \quad \hbar \frac{\partial k_x}{\partial t} = - \frac{\partial V_1}{\partial x} \quad (2.6)$$

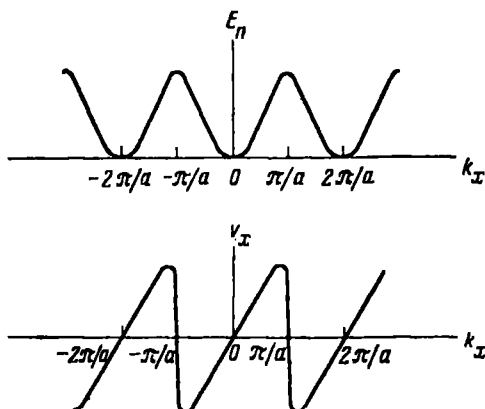
(аналогично для y - и z -компонент). Тогда

$$\begin{aligned} \frac{d(E_n + V_1)}{dt} &= \frac{\partial(E_n + V_1)}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial(E_n + V_1)}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \\ &+ \frac{\partial(E_n + V_1)}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial(E_n + V_1)}{\partial k_x} \frac{dk_x}{dt} + \\ &+ \frac{\partial(E_n + V_1)}{\partial k_y} \frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial(E_n + V_1)}{\partial k_z} \frac{dk_z}{dt} = 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

При этом следует помнить, что E_n не зависит от x , y , z , а V_1 — от компонент вектора \mathbf{k} . Если бы формулы для ускорения (2.5) были неправильны, то соотношение (2.7) не имело бы места. Изложенные рассуждения остаются справедливыми и в присутствии магнитного поля. В самом деле, магнитная сила, будучи пропорциональна $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, перпендикулярна скорости волнового пакета, так что она не совершает работы и не влияет на энергию,

§ 2. Ускорение волнового пакета в электрическом поле

Перейдем теперь к изучению следствий из двух теорем (2.3) (2.5), управляющих движением волнового пакета в периодическом поле и в поле возмущения. Прежде всего рассмотрим случай постоянного внешнего электрического поля (с которым мы встретились бы в простейшей задаче об электропроводности). Большинство результатов можно проиллюстрировать на примере одномерного движения, который и будет поэтому использован в



Фиг. 2.1. Зависимость энергии E_n от k_x в n -й зоне и v_x — скорости вдоль направления x в простой одномерной модели кристалла.

первой части этого параграфа. Согласно уравнениям (2.5), под действием постоянной силы, направленной вдоль оси x , квазимпульс будет равномерно увеличиваться со временем. Посмотрим теперь, как будет меняться скорость.

На поставленный вопрос легко ответить, рассматривая энергию E_n в n -й зоне как функцию волнового вектора и замечая, что скорость $v_x = (1/\hbar) (\partial E_n / \partial k_x)$ пропорциональна наклону кривой зависимости E_n от k_x . Рассмотрим эти

две кривые для простого случая, указанного на фиг. 2.1. Пусть в начальный момент времени ($t=0$) волновой вектор k_x или квазимпульс $p_x = \hbar k_x$ также равен нулю. Как видно из фиг. 2.1, при этом равна нулю и скорость v_x . В постоянном внешнем поле k_x будет равномерно возрастать со временем. Однако по мере приближения k_x к значению π/a , или к краю зоны Бриллюэна, и по мере приближения к максимуму энергетической кривой скорость проходит через максимум, затем уменьшается и в точке π/a обращается в нуль. Затем она становится отрицательной, достигает большого отрицательного значения и постепенно увеличивается до нуля, который достигается при $k_x = 2\pi/a$ и $k_x = 0$. Естественно возникает вопрос: в чем физическая причина этой удивительной ситуации, в которой положительная сила и положительная скорость изменения квазимпульса могут иногда привести к отрицательному ускорению?

Объяснение связано с брэгговским отражением. Как только волновой вектор электрона достигает величины π/a , соответствующая ему длина волны становится равной $2a$, т. е. достигает значения, при котором происходит брэгговское отражение. При этом вероятность отражения или изменения знака скорости становится очень большой; фактически вблизи указанных значений волнового вектора это как раз и происходит. После отражения электрон начнет двигаться в противоположном направлении, и дальнейшее приложение силы будет постепенно замедлять его, затем его скорость изменится на обратную, опять будет возрастать, пока вновь не наступят условия брэгговского отражения, и т. д. В результате мы приходим к периодической зависимости скорости от k_x .

Математически дело обстоит следующим образом. Если электрон почти свободен, то его волновая функция представляет собой в основном плоскую волну с волновым вектором k_x ; примесь других волн с волновыми векторами $k_x + K_{jx}$ при $K_{jx} \neq 0$ очень мала до тех пор, пока мы не окажемся вблизи условий брэгговского отражения. Здесь векторы K_{jx} равны $2\pi j/a$, где j — целое число. Пусть k_x увеличивается от нуля, достигая значения π/a . Тогда волновой вектор $k_x - (2\pi/a)$ достигает значения $-\pi/a$ и соответствующая волновая функция оказывается вырожденной с первоначальной. На краю зоны Бриллюэна эти две волны имеют равные амплитуды; поскольку они соответствуют импульсам, равным по величине и противоположным по знаку, средний импульс, а с ним и скорость волнового пакета обращаются в нуль. При возрастании k_x свыше π/a волна с волновым вектором $k_x - (2\pi/a)$ быстро увеличивается по амплитуде, практически исчерпывая все разложение волновой функции. К тому времени, когда k_x становится равным $2\pi/a$, волновой вектор этой волны обращается в нуль, т. е. она ведет себя, как исходная волна с $k_x = 0$. Заметим, что по мере неограниченного роста k_x весь этот цикл периодически повторяется.

Итак, внешнее поле может вызывать ускорение с противоположным знаком потому, что сила, обусловленная им, не единственная. Она лишь доводит волновой вектор электрона (или волнового пакета) до значения, при котором наступает брэгговское отражение. Последнее представляет собой гораздо более сильный эффект, который и изменяет направление скорости на обратное.

Интересно выяснить не только как движется волновой пакет под действием постоянного поля, но и как он движется под действием силы, не удаляющей его далеко от минимума энергии. Вблизи минимума энергия представляет собой квадратичную функцию от k_x ; ее можно записать в виде разложения в ряд.

начальные члены которого имеют вид

$$E = E_0 + \frac{p^2}{2m^*} = E_0 + \frac{k_x^2 \hbar^2}{2m^*}.$$

Здесь E_0 — энергия в минимуме, а m^* — величина размерности массы. Вообще говоря, m^* никогда не совпадает с массой электрона; исключение составляет случай, когда кривизна энергетической поверхности в минимуме такая же, как и для свободного электрона. Тогда, согласно формулам (2.3), $v_x = k_x \hbar / m^*$, и уравнение (2.5) дает

$$m^* \frac{dv_x}{dt} = m^* \frac{d^2x}{dt^2} = F_x = - \frac{\partial V_1}{\partial x}. \quad (2.8)$$

Мы получили обычное ньютоновское уравнение движения для частицы с массой m^* . Величина m^* называется эффективной массой. Напомним, что это имеет место только в том случае, если мы находимся достаточно близко к минимуму энергетической кривой, так что ее можно заменить параболой.

Аналогичным образом вблизи максимума энергетической кривой, который достигается (на фиг. 2.1) при $k_x = \pi/a$, имеем

$$E = E_1 - \frac{(k_x - \pi/a)^2}{2m^{**}}. \quad (2.9)$$

Здесь E_1 есть значение энергии в максимуме, а m^{**} — новая постоянная. Как и в предыдущем случае, $v_x = -(k_x - \pi/a) \hbar / m^{**}$ и

$$m^{**} \frac{d^2x}{dt^2} = - F_x = \frac{\partial V_1}{\partial x}. \quad (2.10)$$

Иными словами, вблизи потолка зоны мы имеем другую эффективную массу. Удивительнее всего, однако, то, что сила ускоряет частицу в направлении, противоположном ожидаемому. Иначе говоря, электрон ведет себя так, как если бы его заряд был положительным. В действительности это, конечно, не более чем выражение уже известного нам факта, с которым мы встречались при рассмотрении движения в поле постоянной силы: именно в этой области происходит брэгговское отражение, и частица действительно ускоряется в направлении, противоположном тому, какое следовало бы ожидать при действии одного лишь внешнего поля.

Отметим, что в обоих рассмотренных нами случаях эффективные массы m^* и m^{**} могут сильно отличаться от истинной массы электрона. Так, если энергетическая зона очень узка и

кривизна энергетической поверхности у дна зоны мала, то эффективная масса m^* будет велика, иногда значительно больше истинной. С другой стороны, у потолка зоны того же типа, как на фиг. 2.1, где кривизна велика, масса m^{**} будет очень мала. Заметим, что вполне возможны случаи, когда минимум и максимум меняются местами, так что при $k=0$ достигается максимум энергии в зоне. Возможны и другие случаи, когда максимум и минимум зоны достигаются внутри зоны Бриллюэна, а не на ее границах и не при $k=0$. Наконец возможно, особенно для зон с большой энергией, что как потолку, так и дну зоны отвечают очень большие значения кривизны, т. е. очень малые эффективные массы.

Рассмотрим теперь ток, переносимый электронами частично и полностью заполненных зон, и исследуем его изменения во внешнем поле. Прежде всего очевидно, что если энергетические уровни заполнены вплоть до некоторой энергии, то суммарный ток равен нулю. Действительно, в кристалле конечных размеров энергетические уровни отвечают равноотстоящим друг от друга точкам оси k_x . В случае частично заполненной зоны будут заняты все уровни, соответствующие точкам, симметрично расположенным по обе стороны от начала координат $k_x=0$. Иначе говоря, число электронов с отрицательными скоростями будет равно числу электронов с положительными скоростями. Пусть теперь включено постоянное внешнее поле. Тогда все волновые пакеты будут равномерно двигаться вправо по оси k_x , так что по истечении некоторого времени установится конечная результирующая скорость, и, следовательно, результирующий ток, пропорциональный силе и величине промежутка времени. В результате придем к ситуации, описанной в гл. 1, § 6. Пусть мы находимся в области, где энергия электрона аппроксимируется квадратичной функцией импульса (с эффективной массой m^*). Тогда справедливо уравнение (2.8), и за время t_1 скорости всех электронов возрастут на одну и ту же величину. $(-eE/m^*)t_1$. Соответственно задача о вычислении электропроводности сводится к случаю свободных электронов с той лишь разницей, что вместо истинной массы электрона следует использовать эффективную. Ситуация не меняется сколько-нибудь существенно и в том случае, когда степень заполнения энергетической зоны не позволяет вычислять ускорение волнового пакета с помощью уравнения (2.8). Качественная трактовка, основанная на рассмотрении сдвига занятых уровней в пространстве импульсов, остается в силе и здесь.

С другой стороны, положение оказывается совершенно иным, если зона заполнена целиком. В этом случае равномерно запол-

нены все состояния в интервале $2\pi/a$ на оси k_x . Вследствие периодичности скорости полный ток всех электронов при этом равен нулю. В справедливости сказанного можно убедиться и аналитически с помощью простого расчета. Средний ток, определяемый средней скоростью, должен быть пропорционален интегралу от скорости по k_x , взятому в пределах, отличающихся друг от друга на $2\pi/a$. Действительно, интегрирование в таких пределах эквивалентно суммированию по всем электронам или волновым пакетам. Однако, согласно формулам (2.3), средняя скорость пропорциональна производной от E по k_x . Следовательно, интеграл от нее по k_x есть разность энергий на двух концах участка интегрирования; если длина этого участка составляет $2\pi/a$, то вследствие периодичности рассматриваемая разность равна нулю. Тем самым оправдывается сделанное ранее утверждение: вещество, в котором все электроны находятся в полностью заполненных зонах, а частично заполненных зон нет, должно быть диэлектриком; с другой стороны, при наличии частично заполненных зон ток может протекать.

Любопытная ситуация возникает при наложении электрического поля, когда зона почти заполнена, но содержит лишь несколько пустых уровней вблизи своего потолка. Этот случай важен, ибо он реализуется в некоторых полупроводниках и металлах. Пусть заполнены все уровни, кроме одного. Ясно, что под действием поля точка k_x , представляющая пустой уровень, или дырку, будет смещаться вдоль оси k_x так же, как двигался бы волновой пакет. Согласно уравнению (2.10), отсюда следует, что дырка будет ускоряться так, как если бы она несла положительный заряд. Посмотрим теперь, каков будет результирующий вклад в ток. Ток, возникающий под действием электрического поля, фактически переносится всеми электронами, заполняющими занятые энергетические уровни. Как мы видели, если бы все уровни были заполнены, то ток был бы равен нулю. Таким образом, ток обусловлен всеми уровнями, а вклад дырки в него равен по величине и противоположен по знаку вкладу от электрона, который заполнял бы пустой уровень. Итак, в результате ускорения дырки возникает ток, который создавался бы положительным электроном, находящимся на данном уровне. Иначе говоря, как с точки зрения ускорения, так и с точки зрения вклада в ток дырка ведет себя подобно положительно заряженному электрону с эффективной массой m^{**} . Эта трактовка дырок у потолка энергетической зоны как заряженных частиц очень полезна при рассмотрении электропроводности.

Кстати, интересно отметить близкое сходство этого механизма с теорией позитрона. В релятивистской теории электрона

энергия его выражается как сумма обычной кинетической энергии и энергии покоя m_0c^2 , где m_0 — масса покоя, а c — скорость света. Таким образом, возможные энергетические уровни электрона начинаются с большого положительного значения m_0c^2 , простираясь в область самых высоких энергий. Однако релятивистские уравнения движения допускают также набор энергетических уровней с отрицательными значениями энергии, которые начинаются с $-m_0c^2$ и простираются неограниченно вниз. Эта ситуация подобна картине энергетических зон, в которой имеются две разрешенные зоны: одна для отрицательных, а другая для положительных энергий. Между разрешенными областями лежит запрещенная зона, занимающая интервал энергий от $-m_0c^2$ до m_0c^2 .

В обычных условиях предполагается, что нижняя зона целиком заполнена и, следовательно, не дает вклада в ток; все обычные электроны находятся в верхней зоне. Однако при некоторых условиях в нижней зоне могут появиться дырки. С помощью тех же рассуждений, что и в теории полупроводников, можно убедиться, что дырки будут вести себя как положительно заряженные электроны. Это — позитроны, или положительные электроны. Процесс образования пары позитрон — электрон при поглощении света заключается просто в переходе одного из электронов из низшей заполненной зоны в верхнюю, почти пустую. При этом в верхней зоне появляется один электрон обычного типа, а в нижней — дырка, ведущая себя как позитрон. Минимальный квант энергии, способный создать пару, очевидно, равен ширине запрещенной зоны $h\nu = 2m_0c^2$. Это величина порядка 10^6 эв.

Совершенно аналогична картина диэлектрика, у которого все нижние зоны заполнены, а верхние зоны пусты. В этом случае поглощенный свет, энергия кванта которого $h\nu$ не меньше ширины запрещенной зоны, может переводить электрон с потолка нижней зоны на дно верхней. При этом создаются в сущности электрон и положительный электрон, каждый из которых затем может участвовать в переносе тока под действием внешнего поля. Такова простейшая модель явления фотопроводимости. Из нее сразу видно, что должен существовать низкочастотный, или длинноволновый, порог эффекта, за пределами которого энергия фотона слишком мала, чтобы перевести электрон через запрещенную зону. Однако в противоположность релятивистскому случаю ширина запрещенного участка здесь составляет 1—2 эв. Соответственно порог излучения лежит не в области γ -лучей, как при образовании пар, а в видимой области или вблизи нее.

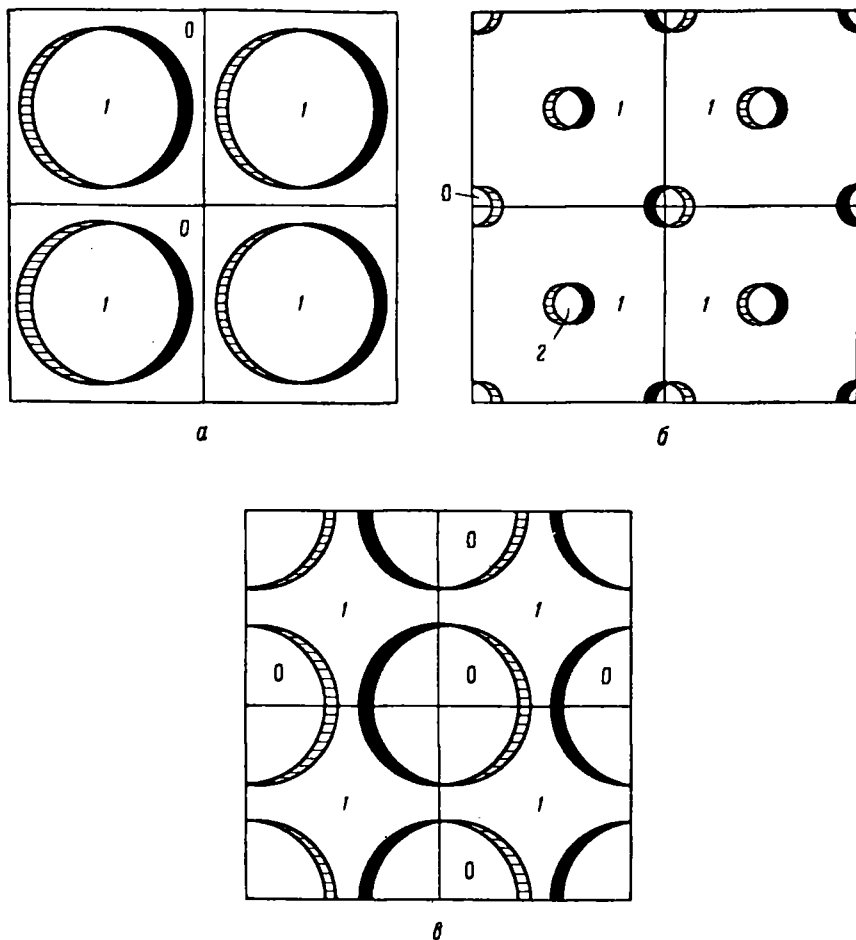
Рассматривая задачу о поведении электрона в периодическом и внешнем электрическом полях, мы явно ограничились одномерным случаем. Метод, однако, легко переносится и на трехмерный случай. При этом общие результаты остаются без изменения. Следует упомянуть лишь об одном осложнении, которое может возникнуть при исследовании поведения волнового пакета вблизи минимума или максимума зоны, когда возникает представление об эффективной массе. Вблизи такого минимума энергия должна быть квадратичной функцией импульса. Вообще говоря, это приводит к эллипсоидальному виду поверхности постоянной энергии. Очевидно, можно выбрать оси x , y , z вдоль главных осей эллипсоида; тогда получается

$$E = E_0 + \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + \frac{p_z^2}{2m_z}, \quad (2.11)$$

где в общем случае величины m_x , m_y , m_z будут различными. При другом выборе координатных осей появились бы и перекрестные члены типа $p_x p_y$; коэффициенты рассматриваемой квадратичной формы, представляющие собой по существу обратные эффективные массы, при этом образовали бы тензор. Этот тензорный характер эффективной массы, вследствие которого электрон или дырка могут ускоряться различным образом в зависимости от направления силы, может быть важен для некоторых кристаллов с несимметричной структурой или в случае, когда минимум или максимум энергии лежит не в центре зоны Бриллюэна. Позднее будут указаны примеры веществ с разными эффективными массами в различных направлениях. Разлагая энергию E в ряд вблизи максимума подобно (2.9), мы по-прежнему можем использовать равенство (2.11), считая лишь величины m_x , m_y , m_z отрицательными. Наконец, вблизи седловой точки некоторые из чисел m будут положительными, а некоторые — отрицательными.

§ 3. Электропроводность металлов и полуметаллов

Итак, теперь нам известно, как ускоряется волновой пакет в присутствии внешнего электрического поля. Объединив эти представления с теми сведениями о рассеянии электронов, которые мы почерпнули из предыдущей главы, можно перейти к изучению процессов проводимости в реальных металлах. На фиг. 2.2 схематически изображены поверхности Ферми (т. е. поверхности постоянной энергии, равной энергии Ферми) для некоторых упрощенных случаев в двумерном кристалле с простой квадратной решеткой. Случай, изображенный на фиг. 2.2, a , отвечает одно-



Фиг. 2.2. Поверхности Ферми — первоначальные и сдвинутые вдоль оси x в результате действия поля за время t_1 .

Указаны три идеализированных случая для двумерной квадратной решетки. Случай *а* — металл со свободными электронами. Окружности с цифрой 1 — поверхности Ферми, охватывающие по одной заполненной энергетической зоне. Вне окружностей в областях с цифрой 0 заполненных энергетических зон нет вообще. Зачерненная область между смещенной и несмещенной поверхностями содержит уровни, заполняемые под действием поля; заштрихованные области (по другую сторону) освобождаются под действием поля. Поверхность Ферми занимает половину всей площади зоны Бриллюэна.

Случай *б* — аналогичная модель двухвалентного металла или полуметалла. В областях с цифрой 1 содержится по одной заполненной зоне, в областях с цифрой 2 имеются по две заполненные зоны, с цифрой 0 — ни одной.

Случай *в* — ситуация, характерная, например, для меди. Это одновалентный металл, к которому приближение свободных электронов совершенно неприменимо. В областях с цифрой 1 имеется по одной заполненной зоне, с цифрой 0 — ни одной. Во всех случаях квадратами обозначены зоны Бриллюэна; точка $k = 0$ соответствует центру квадрата.

валентному металлу, для которого справедлива аппроксимация свободных электронов. Здесь поверхность Ферми будет иметь вид сферы, в двумерной системе она будет представлена окружностью. На каждый атом (или на элементарную ячейку, если она содержит один атом) приходится по одному свободному электрону. Поэтому объем, охватываемый сферической поверхностью Ферми, должен быть в 2 раза меньше объема зоны Бриллюэна (последний отвечает двум электронам на ячейку — по одному с каждой ориентацией спина). При наличии внешнего электрического поля, направленного вдоль оси x , сферы начнут перемещаться вправо, о чем мы уже говорили в гл. 1, § 6 (см. фиг. 1.3). По истечении времени t_1 электроны, переместившиеся в область энергий выше энергии Ферми, начнут рассеиваться. Остановимся, однако, и на других случаях, когда электроны далеко не свободны и должны рассматриваться с помощью зонной теории.

Случай, изображенный на фиг. 2.2, б, соответствует ситуации, которая встречается в двухвалентном металле или полуметалле. На этой схеме различные поверхности (или кривые) разделяют области, содержащие ниже энергии Ферми различное число заполненных зон. Цифра 1 указывает на то, что здесь в большей части зоны Бриллюэна ниже уровня Ферми лежит лишь одна заполненная зона, содержащая по два электрона на атом. Кроме этого, существуют области, обозначенные цифрой 2, в которых ниже уровня Ферми лежат две заполненные зоны. Наконец, в областях с цифрой 0 заполненных зон нет вообще. Поскольку в двухвалентном металле с одним атомом в элементарной ячейке имеется два электрона на атом, площади областей с цифрами 2 и 0 должны быть одинаковы: избыток электронов в одной области должен скомпенсировать недостаток их в другой.

Можно было бы считать, что распределение электронов состоит из трех частей. В первой на состояние приходится по два электрона; занятые уровни заполняют здесь всю зону Бриллюэна. Во второй части имеется сверх того еще по два электрона на состояние (области 2). Наконец, третья часть отвечает распределению дырок по две на состояние (области 0). Истинная ситуация, которая имеет место в двухвалентном металле, конечно, значительно сложнее в силу различий в структуре: у многих двухвалентных элементов имеется по два атома на ячейку, и поверхности Ферми не сферичны. Суть дела, однако, видна уже на этом простом примере.

В полуметалле картина аналогична только что рассмотренной с той лишь разницей, что там общая площадь областей с цифрами 0 и 2 незначительна по сравнению с площадью всей зоны Бриллюэна. В материале рассматриваемого типа области 1

(два электрона на состояние, заполняющие всю зону Бриллюэна) не будут давать вклада в ток. Дополнительные электроны в областях, обозначенных цифрой 2, будут создавать ток, так же как и дырки в областях 0. Ток, создаваемый дополнительными электронами или дырками, будет определяться формулой типа (1.3), только вместо массы свободного электрона m следует подставить одну из эффективных масс, m^* или m^{**} . Поскольку ток и электропроводность зависят от e^2 , результирующий ток (как и электропроводность) будет суммой электронного и дырочного токов.

Число электронов N , фигурирующее в формуле типа (1.3) или (1.4), в случае избыточных электронов есть не что иное, как число электронов, содержащихся в области 2 на фиг. 2.2, б. Аналогично число дырок в формуле для проводимости равно числу их в области 0 (в данном случае оно совпадает с числом избыточных электронов). Фиг. 2.2, б представлена таким образом, чтобы энергия избыточного электрона определялась выражением $k^2\hbar^2/2m^*$, а энергия дырки — выражением $-(k - k_0)^2\hbar^2/2m^{**}$, как в формуле (2.9). В этом случае можно воспользоваться моделью свободных электронов с заменой истинной массы на эффективную. Соответственно в полуметаллах числа электронов и дырок должны быть очень малы. В реальных случаях часто бывает много так называемых «кармашков» с электронами и других — с дырками, ограниченных поверхностями несферической формы. При этом ситуация значительно усложняется по сравнению с описанной выше; часто оказывается вообще невозможным ввести понятие эффективной массы.

Один такой случай изображен на фиг. 2.2, в. Здесь вновь представлен одновалентный металл, но такой, что приближение свободных электронов неприменимо. Площади, обозначенные цифрами 1 и 0, должны быть одинаковы, но вся структура поверхностей постоянной энергии здесь совершенно отлична от случая фиг. 2.4. Фактически случай, представленный на фиг. 2.2, в, аппроксимирует ситуацию в меди, а случай, приведенный на фиг. 2.2, а, — в щелочном металле. Наша общая картина процесса проводимости справедлива и здесь. Пусть электрическое поле приложено вдоль оси x ; тогда все распределение электронов будет смещаться в том же направлении, поскольку так (и притом с постоянной скоростью) движутся все волновые пакеты. Следовательно, появятся области (указанные на фиг. 2.2, в сплошными линиями), в которые поле введет избыточные электроны, в то же время будут и другие области (заштрихованные на рисунке), откуда поле уведет электроны (т. е. введет туда дырки). Как и в предыдущих случаях, ускорение будет продол-

жаться в течение времени t_1 , после чего в результате столкновений установится стационарное состояние со смещенной поверхностью Ферми и с током, пропорциональным напряженности поля и времени t_1 . Очевидно, вычисление электропроводности на этот раз оказывается гораздо более сложным, но общий результат качественно не будет отличаться от полученного ранее.

На фиг. 2.2 указаны некоторые ситуации, с которыми можно встретиться в металлах или полуметаллах. Случай диэлектриков или полупроводников безусловно проще: здесь вся зона Бриллюэна будет содержать какое-то число энергетических зон, расположенных ниже уровня Ферми, который попадает в запрещенную зону. Как уже указывалось, такой материал не проводит тока. Фактически полупроводники в отличие от диэлектриков обладают конечной электропроводностью. Дело в том, что наша картина идеального кристалла при температуре абсолютного нуля в применении к ним не совсем точна. При возрастании температуры в зоне проводимости (ранее пустой) появляется некоторое количество избыточных электронов, возбужденных на уровни выше уровня Ферми; одновременно в валентной зоне (ранее заполненной) появляются дырки. Таким образом возникает возможность переноса тока электронами в зоне проводимости и дырками — в валентной зоне. Полупроводники такого типа называются собственными.

Однако в большинстве реальных полупроводников ток возникает благодаря наличию примесных атомов, которые, конечно, нарушают периодичность поля решетки. Если примесный атом содержит больше электронов, чем атом полупроводника, то дополнительные электроны оказываются в зоне проводимости; тогда материал называется полупроводником n -типа (носители заряда отрицательные). Напротив, если атом примеси имеет меньше электронов, чем атом полупроводника, то электроны извлекаются из валентной зоны и в последней остаются дырки (положительные заряды). Такой материал называется полупроводником p -типа. Мы вернемся к этим вопросам физики полупроводников в § 5 данной главы¹⁾. Предварительно, однако, рассмотрим несколько подробнее корректную постановку задачи в теории электропроводности (до сих пор были намечены лишь некоторые качественные ее черты). Далее, прежде чем переходить к полупроводникам, мы рассмотрим (в следующем параграфе) эффект Холла, позволяющий найти из опыта числа

¹⁾ Фактически сравнивать надо не полные числа электронов в том и другом атоме, а скорее числа валентных электронов. Может быть существенно также положение примесного атома в решетке. Вообще причины, заставляющие атомы примеси поставлять или электроны проводимости, или дырки, называются, по-видимому, более сложными. — *Прим. ред.*

электронов и дырок, участвующих в переносе тока в металлах, полуметаллах или полупроводниках.

Более детальное рассмотрение теории проводимости выходит за рамки этого тома. Имеется много хороших книг, в которых подробно излагается теория явлений переноса, включая как электропроводность, так и теплопроводность. Среди недавно вышедших монографий следует особенно рекомендовать книгу Займана [8]. Среди более ранних укажем монографии Мотта и Джонса, Фрелиха, Зейтца, Вильсона и др. Точные названия этих и других книг указаны в библиографии в конце тома. Помимо уже рассмотренного ранее вопроса о движении волнового пакета в периодическом и внешнем полях, мы отметим здесь лишь некоторые особенности, характерные для корректной постановки задачи.

Прежде всего необходимо тщательно исследовать влияние тепловых колебаний решетки на рассеяние электронных волн. Для этого надлежит в первую очередь определить явно синусоидальный потенциал U_1 , фигурирующий в уравнении (2.6) и обусловленный синусоидальной звуковой волной. Эта задача решалась разными способами, описанными, например, в указанной выше книге Займана. Один из простейших путей состоит в следующем. Представим периодический потенциал в виде суммы сферических потенциалов, созданных различными атомами решетки; посмотрим, как он изменится, когда атомы жестко смещаются из своих положений равновесия (как это и происходит в звуковой волне). Один из получающихся при этом результатов остается в силе и при более сложном подходе: в первом приближении синусоидальный потенциал возмущения обусловлен только продольными, но не поперечными звуковыми волнами.

Более реалистичным оказался подход, впервые предложенный Бардином и Шокли [1]¹⁾ в применении к полупроводникам. Указанные авторы ввели представление о так называемом потенциале деформации. В продольной звуковой волне различные части кристалла находятся в состоянии сжатия или расширения. Бардин и Шокли рассмотрели однородно сжатый или расширенный кристалл. Потенциальная энергия электронов в нем, разумеется, будет отличаться от своего значения в деформированном кристалле. В первом приближении это изменение сводится к появлению дополнительного постоянного слагаемого в среднем потенциале; при прохождении синусоидальной звуковой волны это слагаемое приводит к синусоидальному потенциалу U_1 , называемому потенциалом деформации. До последнего времени было

¹⁾ Аналогичный метод был одновременно и независимо предложен М. Ф. Дейгеном и С. И. Пекаром. [Труды Института физики АН УССР, 7, 108 (1956).] — *Прим. ред.*

очень трудно с должной точностью оценить этот потенциал деформации. Однако в недавней работе [2], выполненной методом присоединенных плоских волн для теллурида свинца, удалось довольно точно вычислить потенциал деформации, исходя непосредственно из основных уравнений квантовой механики.

Вычислив синусоидальный потенциал возмущения, связанный со звуковой волной, мы должны затем рассмотреть задачу о рассеянии электронной волны на нем. Это простой расчет, очень сходный с задачей о рассеянии рентгеновских лучей, на которой мы еще остановимся позднее в гл. 6, § 5. В сущности, пользуясь методами приложения 1, мы можем свести дело к решению уравнения Шредингера для частицы в поле синусоидального потенциала. (Последняя задача детально рассматривалась в т. 2, гл. 6, § 6¹.) Таким путем можно прийти к количественной теории электронного аналога бриллюэновского рассеяния (качественно это явление было описано в предыдущей главе). В результате определяется вероятность рассеяния электрона звуковой волной известной амплитуды.

Далее нужно с помощью кинетической теории найти измененную функцию распределения электронов по скоростям (или по импульсам), принимая во внимание как действие внешнего ускоряющего поля, так и рассеяние. Следует помнить, что фактически не существует никакого фиксированного времени t_1 , протекающего до столкновения, — можно говорить только о вероятности столкновения. Последняя в данном случае зависит (в силу статистики Ферми) от степени заполнения состояния, в которое электрон может перейти при рассеянии. Далее, вероятность рассеяния нельзя считать одной и той же для всех электронов независимо от их скоростей или импульсов. В результате всех этих усложнений полная теория проводимости оказывается очень громоздкой. Тем не менее она может быть полностью построена только на основе изложенных выше принципов²). Уравнение статистической механики, из которого находится возмущенная функция распределения электронов в пространстве импульсов, называется уравнением Больцмана³). Вывод и его обсуждение можно найти в любом учебнике по кинетической теории. Реше-

1) См. также [9]. — *Прим. ред.*

2) При более подробной квантовомеханической трактовке выясняется, что рассматриваемая теория явления переноса, основанная на квазиклассическом уравнении Больцмана, в определенных случаях встречается с серьезными трудностями. Точное выражение для электропроводности, полученное методами квантовой механики, сводится к результату кинетического уравнения лишь при не слишком малых значениях подвижности и в не слишком сильном магнитном поле. Подробнее об этом см., например, в работе [10]. — *Прим. ред.*

3) Часто употребляется также термин «кинетическое уравнение». — *Прим. ред.*

ние этого уравнения, однако, связано с трудностями. Здесь уже оказывается недостаточным предположение, которым мы пользовались в элементарной теории, постулируя, что функция распределения при наличии возмущения имеет вид первоначальной функции Ферми, только сдвинутой в направлении поля на величину смещения волнового пакета (в пространстве импульсов) за время t_{\perp} . Функцию распределения нужно определять точнее; в значительной степени это облегчается наличием вариационного принципа, изложенного, например, в книге Займана. Оказывается, что функцию распределения можно найти, минимизируя значение некоторого интеграла. Это позволяет нам поступать примерно так же, как в случае уравнения Шредингера, при решении которого можно воспользоваться условием минимальности энергии. При этом можно ввести пробные функции распределения и минимизировать упомянутый выше интеграл, варьируя входящие в них параметры. Указанное условие минимальности тесно связано с термодинамическим принципом максимума энтропии.

Полная теория учитывает все эти обстоятельства; в результате получается полный расчет электропроводности кристалла при наличии тепловых колебаний. Такие же рассуждения необходимо провести и в случае рассеяния электронных волн на примесных атомах, дислокациях и других источниках рассеяния. Далее возникает задача о совместном рассмотрении двух типов рассеяния. Таким образом, задача в целом очень сложна, что обусловило появление множества работ. В конце концов удалось получить значения электропроводности правильного порядка величины; для щелочных металлов достигнуто и неплохое количественное согласие с опытом. Более подробное количественное рассмотрение, однако, составляет еще задачу на будущее. Упомянутое выше исследование потенциала деформации в PbTe, возможно, дает нам пример результатов, которые можно надеяться получить.

§ 4. Эффект Холла

Много лет назад Холл [3] обнаружил, что если проводник с током поместить в магнитное поле, то поперек проводника перпендикулярно как току, так и магнитному полю автоматически возникает разность потенциалов. Она пропорциональна произведению тока на магнитную индукцию. Выражая эту разность потенциалов через величины, не зависящие от размеров образца, мы приходим к представлению о поперечном электрическом поле, напряженность которого пропорциональна магнитной индукции и плотности тока. Постоянная Холла определяется как от-

ношение напряженности поперечного электрического поля к магнитной индукции и плотности тока. Происхождение эффекта Холла можно понять с помощью простых соображений.

Напомним, что электрон, помещенный в электрическое и магнитное поля, испытывает действие двух сил. Первая из них пропорциональна заряду электрона и напряженности электрического поля и направлена вдоль последней; вторая, пропорциональная заряду электрона, его скорости и магнитной индукции, направлена перпендикулярно обоим последним векторам. Таким образом, в векторных обозначениях результирующая сила имеет вид

$$\mathbf{F} = q[\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})]. \quad (2.12)$$

Здесь q — заряд, \mathbf{E} — напряженность электрического поля, $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ — векторное произведение скорости на магнитную индукцию. Как мы видели в § 1 этой главы при изучении движения волнового пакета, именно эта сила определяет скорость изменения квазиимпульса со временем.

В эффекте Холла скорость электрона \mathbf{v} направлена вдоль проводника, а магнитная индукция \mathbf{B} перпендикулярна скорости. Поэтому вектор $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ также поперечен. Иными словами, электрон, двигаясь вдоль образца в магнитном поле, подвергается действию поперечной силы, стремящейся столкнуть его к одной из граней проводника. Разумеется, это не может продолжаться вечно, так как электрон столкнется с поверхностью образца, остановится и останется там в виде поверхностного заряда. Последний приведет к возникновению поперечного электрического поля внутри проводника, и процесс будет идти до тех пор, пока это поле не станет достаточно большим, так что результирующая поперечная сила, определяемая формулой (2.12), обратится в нуль. В дальнейшем электроны будут двигаться вдоль образца, не испытывая поперечного ускорения. Согласно (2.12), для этого напряженность поперечного поля \mathbf{E} и вектор $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ должны быть равны по величине, т. е. $E = vB$ (теперь мы имеем дело только со скалярными величинами). Напомним, что плотность тока J определяется величиной Nqv , где N есть число носителей тока в единице объема, а q — заряд. Таким образом,

$$E = \frac{JB}{Nq} = RJB, \quad \text{где} \quad R = \frac{1}{Nq}. \quad (2.13)$$

Здесь R — постоянная Холла. Мы пришли к выводу о необходимости существования эффекта Холла в том виде, в каком он наблюдается на опыте.

Если мы имеем дело с электронами, то заряд q следует приравнять $-e$. Знак выбран так, чтобы постоянная Холла была отрицательна в случае, когда ток переносится электронами с

отрицательным зарядом; в то же время при положительном заряде носителей положительной должна быть и постоянная Холла. Как можно показать, эти простые рассуждения, завершающиеся выводом формулы (2.13), дают правильный результат для случая электронов, подчиняющихся распределению Ферми (как это имеет место в одновалентном металле). Для классического максвелловского распределения более тщательный расчет приводит к появлению добавочного численного множителя в формуле (2.13).

В ранних работах по эффекту Холла, выполненных еще до 1900 г., было установлено, что во многих металлах постоянные Холла отрицательны, чего и следовало ожидать для электронной проводимости. В некоторых металлах, однако, постоянные Холла оказались положительными. Это правило Холла¹⁾ применимо к предположению о проводимости, обусловленной дырками, которые ведут себя как положительные электроны, т. е. к картине того же типа, что получается и на основании квантовой теории энергетических зон. Разумно предположить, что в металлах с положительными постоянными Холла мы имеем дело с ситуацией типа изображенной на фиг. 2.2, б, причем по какой-то причине вклад дырок в ток превышает вклад электронов.

Для дальнейшего необходимо понять, как выводится формула для постоянной Холла в квантовой механике. Вывод ее довольно сложен и не будет приведен в этом томе. Его можно найти в некоторых работах, указанных в библиографии в конце книги (например, в книгах, упоминавшихся в предыдущем параграфе). Однако в простых случаях, когда справедливы уравнения (2.8) — (2.10), результат также оказывается простым. Как и следовало ожидать, в условиях применимости уравнений (2.8) и (2.10) мы получаем соответственно $R = -1/Ne$ и $R = 1/Ne$. Иначе говоря, эффективная масса выпадает из результата, так же как из классической формулы для постоянной Холла выпадает истинная масса электрона. Следовательно, в этих случаях измерение постоянной Холла дает число свободных электронов в зоне проводимости.

К сожалению, в промежуточных случаях формула для постоянной Холла (разумеется, допускающая непрерывный переход от одного предельного случая к другому) оказывается крайне громоздкой, и ее трудно сопоставить с другими наблюдаемыми величинами. Есть, однако, один промежуточный случай, в котором формула заметно упрощается и становится особенно полезной в применении к полуметаллам и полупроводникам.

¹⁾ Эти выводы суммированы в работе [4]. — *Прим. ред.*

Это случай, изображенный на фиг. 2.2, б. Он отвечает одновременному присутствию небольшого числа электронов на дне одной из зон и дырок у потолка другой зоны. Первые подчиняются уравнению (2.8), а вторые — (2.10).

Обозначим через n_e число электронов, приходящихся на атом, через n_h — число дырок на атом, а через N — число атомов в единице объема. Пусть далее μ_e и μ_h — соответственно подвижности электронов и дырок. Тогда

$$R = \frac{1}{Ne} \frac{n_h \mu_h^2 - n_e \mu_e^2}{(n_h \mu_h + n_e \mu_e)^2}. \quad (2.14)$$

Эта формула допускает предельный переход к случаям, когда либо n_e , либо n_h обращается в нуль. Далее, электроны и дырки, взятые в должных количествах, могут компенсировать друг друга, так что возможны все промежуточные стадии между случаями только положительных и только отрицательных носителей. Вывод равенства (2.14) дается, например, в цитированной выше книге Займана.

Интересные результаты можно получить, изучая постоянные Холла для разных металлов. Для щелочных металлов постоянные Холла оказываются близкими к $-1/Ne$, где N — число атомов в единице объема. Это означает, что здесь оправдано представление об одном свободном электроне на атом, причем справедливо уравнение (2.8). Это приближенно правильно и для меди, серебра и золота, хотя и не так точно, как для щелочных металлов. Для некоторых других металлов согласие с ожидаемым числом электронов оказывается гораздо худшим. По-видимому, это можно объяснить незаконностью использования уравнений (2.8) и (2.10) в указанных случаях.

Вероятно, самый интересный случай представляют полуметаллы As, Sb и Bi. Постоянные Холла у них необычайно велики. Также необычно большими оказываются и другие магнитные эффекты, связанные с ними. Обычно это интерпретируют, предполагая, что в названных веществах электроны почти полностью заполняют одну зону и лишь в очень небольшом количестве — вторую. Таким образом, оказывается справедливой формула (2.14) при очень малых значениях n_h и n_e . Знаменатель в ней будет гораздо меньше числителя, если только положительные и отрицательные члены в последнем не компенсируются (по-видимому, в данном случае это не имеет места). Тогда постоянная Холла должна быть очень велика, что и наблюдается. Однако, несмотря на малую величину эффективного числа свободных электронов, электропроводность рассматриваемых веществ отнюдь не так мала, как можно было бы ожидать на основании

формулы (1.4). Это должно означать, что эффективная масса m^* или m^{**} очень мала, т. е. соответствующая подвижность велика. Постоянная Холла у висмута отрицательна, а у сурьмы положительна. Следовательно, числитель выражения (2.14) в этих двух случаях имеет разные знаки: в висмуте более существенную роль в переносе тока играют электроны, а в сурьме — положительные дырки.

Из этих замечаний явствует, что эффект Холла дает такую информацию о проводниках, которую невозможно получить каким-либо другим путем. Действительно, он позволяет непосредственно определить число носителей заряда и их знаки. В то же время интерпретация данных об электропроводности усложнена тем, что в последнюю входят эффективные массы, а также квадрат, а не первая степень заряда. Последнее не позволяет отличить положительные носители заряда от отрицательных. Для изучения полупроводников, к которым мы сейчас перейдем, эффект Холла еще более важен, чем для металлов. Здесь мы имеем очень небольшое количество носителей тока, и, следовательно, постоянная Холла значительно больше, чем в металлах, и ее легче определить с помощью формул (2.14) для постоянной Холла и (1.6) для электропроводности. Для полупроводников удалось надежно установить порознь числа положительных и отрицательных носителей заряда и их подвижности в ряде полупроводников. В следующей главе мы рассмотрим еще один магнитный эффект, циклотронный резонанс, и связанные с ним явления, позволяющие иногда найти значения эффективных масс непосредственно из опыта.

Эффект Холла и другие связанные с ним гальваномагнитные явления изучались во многих работах как сами по себе, так и в качестве средства для экспериментального изучения ряда веществ с указанной выше точки зрения. В библиографии в конце настоящего тома приведены статьи по этим вопросам (см. также список литературы к данной главе).

§ 5. Полупроводники¹⁾

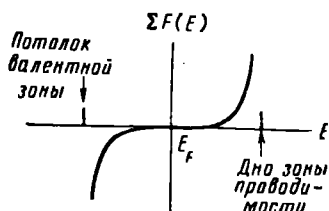
Закончив отступление в область эффекта Холла, обратимся теперь к изучению полупроводников. В первую очередь рассмотрим собственный полупроводник, т. е. вещество, в котором, как и в диэлектрике, нижняя (валентная) зона целиком заполнена,

¹⁾ В этом параграфе мы следуем статье [5], к которой и надлежит обращаться за подробностями. (Подробное изложение теории полупроводников дается в книге [11]. Экспериментальные данные можно найти, например, в книгах [12, 13]. — *Прим. ред.*)

верхняя — зона проводимости — пуста, и эти две разрешенные зоны разделены запрещенной. Однако в отличие от диэлектрика ширина запрещенной зоны здесь столь мала, что уже при умеренных температурах значительное число электронов может возбудиться в зону проводимости, оставляя при этом равное число дырок в валентной зоне. Как следует из формулы (1.6), электропроводность такого вещества будет определяться выражением

$$\sigma = N_h e \mu_h + N_e e \mu_e, \quad (2.15)$$

где N_h , N_e — числа положительных и отрицательных носителей заряда в единице объема, μ_h и μ_e — соответствующие подвижности. Подвижности в полупроводниках по порядку величины и по температурной зависимости не очень сильно отличаются от наблюдаемых в металлах, так что резкая разница между теми и другими веществами определяется различными значениями чисел N . Посмотрим, что дает статистика Ферми для их температурной зависимости.



Фиг. 2.3. Энергетическая зависимость числа занятых уровней $\sum F(E)$ для собственного полупроводника.

При $\sum F(E) = 0$ число электронов достаточно для того, чтобы компенсировать положительный заряд кристалла.

сумму $\sum F(E)$ по всем состояниям с учетом обеих ориентаций спинов. Как мы видели в гл. 1, § 4, эта сумма должна равняться полному числу электронов. Вычислив ее как функцию E_F , мы получим результат, представленный на фиг. 2.3; для простоты здесь предположено, что эффективные массы m^* и m^{**} в обеих зонах одинаковы. Из фигуры видно, что рассматриваемая сумма равна N , когда энергия E_F расположена на полпути между валентной зоной и зоной проводимости, т. е. в середине запрещенной зоны. Тем самым определяется положение уровня Ферми. Очевидно, ситуация здесь сложнее, чем в металле, где уровень Ферми соответствует точно верхней границе занятых уровней.

Зная положение уровня Ферми, мы можем теперь воспользоваться формулой (1.8), чтобы найти числа электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. При обычных темпера-

Пусть распределения энергетических уровней в пустой и заполненной зонах таковы, что справедливы уравнения (2.8) — (2.10). Иначе говоря, пусть плотности состояний определяются формулой (1.13), в которой массу m следует заменить на m^* или m^{**} . Тогда, пользуясь формулой (1.8), легко вычислить

турах и в обычных полупроводниках ширина запрещенной зоны гораздо больше. Обозначим эту ширину через ΔE . Очевидно, фигурирующий в формуле (1.8) экспоненциальный множитель $\exp(E - E_F)/kT$ для всех уровней зоны проводимости не меньше, чем $\exp(\Delta E/2kT)$, и единицей по сравнению с ним можно пренебречь. Следовательно, если E есть энергия уровня в зоне проводимости, отсчитанная от дна зоны, то функция $F(E)$ приближенно имеет вид

$$F(E) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{E}{kT}\right). \quad (2.16)$$

Вычислив теперь число уровней на единицу энергии с помощью формулы (1.13) (или эквивалентного соотношения), мы легко можем превратить сумму $\sum F(E)$ в интеграл и явно выполнить интегрирование по всем уровням зоны проводимости. Расчет дает для числа электронов в единице объема в зоне проводимости

$$\sum F(E) = \frac{2}{h^3} (2\pi m^* kT)^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right). \quad (2.17)$$

Легко показать, что такой же формулой дается и число дырок в валентной зоне (оно получается суммированием величины $2[1 - N(E)]$ по всем уровням указанной зоны). Напомним, что по предположению $m^* = m^{**}$. Если отказаться от него, то формулы несколько усложнились бы, но не изменились по существу. Разумеется, числа электронов и дырок должны быть одинаковы, чтобы получилось правильное значение суммы $F(E)$ по всем уровням.

Как видно из формулы (2.17), числа электронов и дырок пропорциональны малому множителю $\exp(-\Delta E/2kT)$, очень быстро уменьшающемуся до нуля при стремлении температуры к нулю. Этот множитель — самый главный в выражении для электропроводности (2.15). Полученные результаты удобно изобразить, представив логарифм электропроводности как функцию обратной температуры. Эта зависимость будет очень близка к прямой линии. Действительно, температурная зависимость подвижности и множитель $T^{3/2}$ в уравнении (2.17) приводят к сравнительно слабому отклонению от прямой линии, которая обусловлена экспоненциальной функцией; к тому же эти две зависимости приближенно взаимно компенсируются¹⁾. Подобные прямые линии действительно наблюдались на опыте в случае собственных по-

¹⁾ Так обстоит дело в случае рассеяния электронов на колебаниях решетки. При других механизмах рассеяния компенсации нет, но главную роль в выражении (2.15) по-прежнему играет температурная зависимость N_v и N_c . — Прим. ред.

лупроводников; из наклона прямой можно найти ширину запрещенной зоны ΔE . Фактически, однако, собственные полупроводники встречаются довольно редко. Это объясняется важной ролью примесей, к описанию которой мы сейчас и перейдем. Чаше всего оказывается почти невозможным приготовить столь чистый полупроводник, чтобы он вел себя как собственный. Мы рассмотрели этот случай главным образом в качестве подготовки к исследованию более распространенных примесных полупроводников.

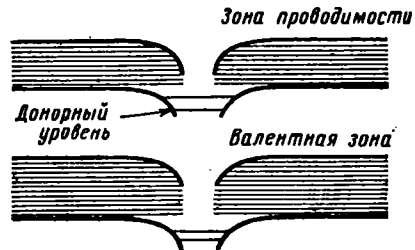
Посмотрим теперь, к чему может привести наличие атомов примеси в полупроводниках. Для определенности исследуем один из наиболее подробно изученных материалов, кремний или германий. Эти вещества, как известно, имеют по четыре валентных электрона на атом и кристаллизуются в решетке типа алмаза. В последней каждый атом имеет по четыре ближайших соседа, так что электронов оказывается как раз достаточно для образования ковалентных связей с соседними атомами. При этом валентная зона заполняется целиком, а зона проводимости остается пустой, что и наблюдалось на опыте. Пусть теперь один из узлов решетки занят не атомом Si или Ge, которому надлежало бы там быть, а примесным атомом N, P, As или Sb, во внешней оболочке которого имеется пять электронов. Допустим на время, что примесный атом потерял один из своих электронов. Тогда у него останется как раз четыре, сколько и требуется для образования ковалентной структуры. При этом ковалентные связи останутся в целостности и все уровни валентной зоны будут заполнены. Однако периодическая структура решетки будет нарушена: примесный атом превратится фактически в положительный ион, создающий некоторое возмущение. Последнее можно описать потенциалом V_1 (типа введенного в § 1 этой главы). Поскольку это потенциал положительного иона, он будет иметь кулоновский вид, как если бы на месте примесного атома находился протон, но с одним различием, обусловленным довольно большой диэлектрической проницаемостью рассматриваемых полупроводников. Именно вместо множителя $4\pi\epsilon_0$ в знаменателе кулоновской формулы появится $4\pi\epsilon$, где ϵ — диэлектрическая проницаемость ($\epsilon > \epsilon_0$). Следовательно, кулоновская сила будет во много раз слабее, чем в случае протона.

Энергетические уровни электронов в этом поле возмущения уже не будут такими, как в неискаженной решетке. В § 1 было показано, как нужно рассматривать поведение волнового пакета в присутствии возмущения данного типа. В условиях применимости уравнения (2.8) волновой пакет в присутствии потенциала V_1 движется как частица с массой m^* . В приложении 1 показано, что в таких случаях можно написать и уравнение

Шредингера для частицы с массой m^* в поле потенциала V_1 , обращаясь с возмущенными волновыми функциями по правилам квантовой механики. Наши прежние результаты относительно движения волнового пакета справедливы лишь в предельном случае, когда квантовая механика переходит в классическую. Следовательно, электрон в поле примесного атома будет подчиняться уравнению Шредингера, подобно частице с массой m^* в кулоновском поле (должным образом уменьшенном по сравнению с полем протона).

Это уравнение, разумеется, аналогично задаче об атоме водорода с точностью до значений заряда и массы, и оно имеет аналогичные собственные функции и собственные значения энергии. Влияние меньшей кулоновской силы сводится к уменьшению всех энергий и к увеличению размеров орбит. Такой же эффект обусловлен и массой m^* , которая в этом случае оказалась значительно меньше истинной массы электрона. Суммарный эффект, таким образом, заключается в том, что вблизи примесного атома волновые функции электрона имеют водородоподобный вид по функциям в заметно увеличенном масштабе. Соответственно они «размазаны» по области с линейными размерами, во много раз превышающими атомный диаметр; равным образом энергетический спектр воспроизводит спектр атома водорода, но в значительно меньшей энергетической шкале. Уровень l s соответствует здесь не 13,6 эв, а примерно 0,1 эв, если взять разумные значения всех констант. Кроме этих дискретных уровней, имеется еще непрерывный спектр, отвечающий энергиям, при которых электрон может оторваться от иона. Этот непрерывный спектр соответствует по существу зоне проводимости.

Рассмотрим несколько внимательнее соотношение между этими уровнями и теми, которые имелись бы в отсутствие примесного атома. Тогда получается картина, представленная на фиг. 2.4, где изображены потолок и дно зоны проводимости и валентной зоны при наличии потенциала возмущения V_1 . Эти величины теперь зависят от координат, отсчитанных от точки, в которой находится возмущающий атом. Дискретные примесные уровни, появление которых описано в предыдущем параграфе, указаны на фигуре ниже зоны проводимости. Электрон на таком



Фиг. 2.4. Валентная зона и зона проводимости вблизи атома-донора. Указаны донорные уровни.

уровне расположен, грубо говоря, в области, указанной на фигуре, где классическое значение кинетической энергии положительно. Указаны также уровни непрерывного спектра, заполняющие невозмущенную зону. Однако в связи с присутствием примесного атома волновые функции непрерывного спектра изменяются. Согласно классической трактовке § 2 данной главы, в периодическом поле и поле возмущения классическая скорость вещественна, пока мы находимся внутри разрешенной зоны. На границах последней скорость обращается в нуль, а в запрещенной зоне она становится мнимой. В области энергий, отвечающей запрещенной зоне, решение уравнения Шредингера экспоненциально уменьшается. Из верхней части фигуры видно, к чему приводит искажение границ зоны под действием потенциала возмущения V_1 : вблизи примесного атома уровни выпадают из континуума в запрещенную зону. Следовательно, волновые функции, принадлежащие этим уровням, будут экспоненциально уменьшаться по мере приближения к примесному атому. При более тщательном рассмотрении¹⁾ выявляется еще одно обстоятельство. Дело не только в уменьшении волновых функций непрерывного спектра вблизи примесного атома, где дискретные волновые функции возрастают настолько, что суммарная плотность заряда (если все уровни заняты) практически не изменяется. При этом остается неизменным также суммарное число уровней в зоне, включая и дискретные уровни; это число не зависит от того, имеется ли примесный атом или нет. Следовательно, число вновь возникающих дискретных уровней точно компенсируется уменьшением числа уровней непрерывного спектра. Это соответствует уменьшению эффективного объема твердого тела за счет «вырезания» области вблизи примесного атома (в названной области волновые функции непрерывного спектра экспоненциально малы).

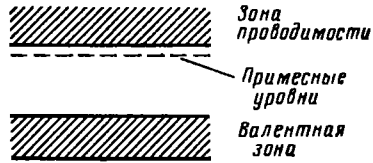
Мы можем теперь исследовать влияние этих изменений волновых функций и энергетических уровней на поведение вещества. Как видно из фиг. 2.4, валентная зона будет изменяться так же, как и зона проводимости. Напомним, что в рассматриваемой системе имеется достаточно электронов, чтобы заполнить валентную зону, плюс еще один. Как мы только что видели, в валентной зоне, несмотря на наличие возмущения, остается прежнее число уровней. Следовательно, когда все они будут заполнены, останется еще один электрон. При абсолютном нуле температуры он займет низший из доступных ему уровней -- низший дискретный уровень вблизи примесного атома. Таким

¹⁾ Этот вопрос наряду с другими, относящимися к трактовке примесных атомов, рассматривается в приложении 2.

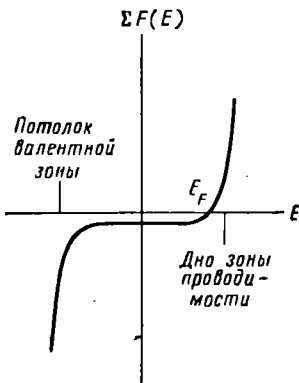
образом, этот электрон окажется связанным и не будет принимать участия в проводимости. При увеличении температуры, однако, требуется лишь небольшое возбуждение, чтобы перевести этот электрон на уровни непрерывного спектра в зоне проводимости, где он уже сможет участвовать в переносе тока. Соответственно заметная проводимость здесь возникает при гораздо меньшей температуре, чем в собственном полупроводнике.

Разумеется, заметный эффект достигается лишь в том случае, если число примесных атомов достаточно велико. Фактически, однако, это число гораздо меньше полного числа атомов решетки; один примесный атом на тысячу — это уже достаточно много.

Пусть атомы примеси рассматриваемого типа беспорядочно распределены по всему кристаллу. С каждым из них будут связаны уже рассматривавшиеся нами дискретные уровни. Они лежат несколько ниже дна зоны проводимости, а принадлежащие им волновые функции локализованы вблизи соответствующих примесных атомов. Энергетическую схему такого вещества часто изображают так, как это представлено на фиг. 2.5. Штриховой линией обозначены примесные уровни; зоне проводимости и валентной зоне отвечают волновые функции, охватывающие весь кристалл.



Фиг. 2.5. Символическое изображение примесных уровней.

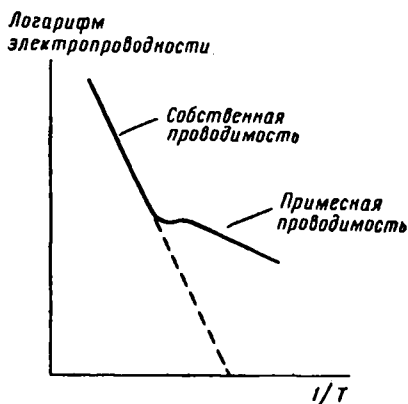


Фиг. 2.6. Энергетическая зависимость полного числа электронов в полупроводнике n -типа.

Посмотрим теперь, как примесные уровни влияют на статистику электронов. Мы имеем некоторое довольно малое число дополнительных энергетических уровней и соответственно избыток электронов. Чтобы определить новое положение уровня Ферми, необходимо вновь построить зависимость суммы $\Sigma F(E)$ от E_F . Рассматривая кривую, изображенную на фиг. 2.3, мы видим, что сумма $\Sigma F(E)$ не меняется заметно за счет присутствия примесных уровней, поскольку их количество

мало. Серьезное изменение, однако, связано с тем, что теперь должен возрасти результат суммирования за счет электронов, поставляемых атомами примеси. Следовательно, найдем значения E_F , проведя горизонтальную линию более высоко (фиг. 2.6),

Иначе говоря, уровень Ферми окажется гораздо ближе к дну зоны проводимости, чем раньше. В результате, вычислив число электронов в зоне проводимости, мы получим выражение типа (2.17), но в экспоненте теперь будет стоять не $\Delta E/2$ (как это было в случае собственного полупроводника), а другая, гораздо меньшая величина, только что нами найденная. Соответственно резко возрастет число электронов в зоне проводимости. С другой стороны, определяя число дырок, мы должны будем подставить в экспоненту энергетическое расстояние между новым уровнем Ферми и потолком валентной зоны. Оно гораздо больше, чем в собственном полупроводнике, в силу чего дырок здесь будет значительно меньше. Очевидно, в рассматриваемом случае количе-



Фиг. 2.7. Логарифм электропроводности полупроводника как функция $1/T$.

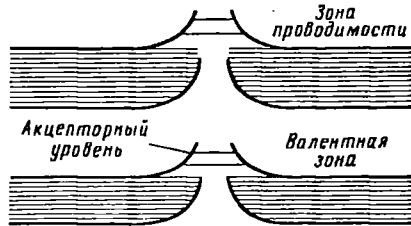
практически не зависит от температуры вплоть до высоких температур. При дальнейшем нагревании вступает в игру собственная проводимость, и при достаточно высокой температуре она начинает превалировать. Таким образом, график зависимости логарифма электропроводности от обратной температуры имеет вид, показанный на фиг. 2.7. Прямая линия отвечает собственной проводимости, и наклон ее, как мы видели, соответствует величине $\Delta E/2$. Однако при больших значениях $1/T$ (т. е. при более низкой температуре) электропроводность уже не убывает, как в собственном полупроводнике, а становится приблизительно постоянной. При дальнейшем охлаждении должно было бы начаться новое ее уменьшение; в ряде случаев, однако, до столь низких температур дойти не удалось.

До сих пор мы рассматривали полупроводники с примесями, способными отдавать электроны в зону проводимости. Как уже

слова электронов и дырок не должны обязательно совпадать. Напротив, их разность есть число электронов, поставляемых атомами примеси.

Таким образом, температурная зависимость числа электронов проводимости будет иметь следующий общий вид. При температуре абсолютного нуля свободных электронов нет вообще. Однако уже при довольно низких температурах начинается ионизация примесных атомов; при этом число электронов в зоне проводимости примерно равно числу атомов примеси, т. е.

указывалось, в таких случаях говорят о материале *n*-типа; соответствующие примеси называются донорами. Существуют и полупроводники *p*-типа, содержащие примеси-акцепторы и обладающие дырочной проводимостью (знак носителей заряда в них — положительный). К числу примесей такого типа относятся атомы замещения, у которых не хватает электронов для заполнения валентной зоны. Так, в кремнии или германии роль акцепторов могут играть алюминий или галлий. Посмотрим, как нужно изменить в этом случае нашу картину зон. Примесный атом замещает в решетке нормальный атом кремния или германия. Допустим, что он получил откуда-то лишний электрон, так что валентная зона целиком заполнена. Этот лишний электрон будет локализован на примесном атоме, превращая его в отрицательный ион. Возникающее кулоновское поле поднимет потолок валентной зоны, равно как и дно зоны проводимости (фиг. 2.8). Мы получим теперь дискретные уровни у потолка зоны. Эти уровни будут относиться к дыркам, описывающим водородоподобные орбиты около отрицательных ионов. Как и раньше, в искаженной зоне содержится столько же уровней, сколько их было в случае идеальной решетки. Лишний электрон, который



Фиг. 2.8. Валентная зона и зона проводимости вблизи атома-акцептора.

Указаны акцепторные уровни.

мы добавили для заполнения валентной зоны, будет находиться на самом ее верху, т. е. на дискретном уровне. Если этот электрон убрать, обеспечив тем самым электрическую нейтральность кристалла, то дискретный уровень окажется вакантным. Мы получим, таким образом, вакантный примесный уровень, расположенный несколько выше потолка валентной зоны. При повышении температуры один из электронов валентной зоны может возбудиться на этот уровень. Соответственно в области непрерывного спектра останется дырка, что и приведет к проводимости *n*-типа. Уровень Ферми окажется теперь не у дна зоны проводимости, а чуть выше потолка валентной зоны. При наличии достаточного количества акцепторов мы получим (при обычных температурах) столько же свободных дырок, в то время как число электронов проводимости будет очень мало. Наблюдаемый результат (в части, касающейся температурной зависимости электропроводности) будет таким же, как и в случае полупроводника *n*-типа. С помощью эффекта Холла, однако, можно отличить один материал от другого.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bardeen J., Shockley W., Phys. Rev., 80, 72 (1950).
2. Ferreira L. G., Phys. Rev., 137, A1601 (1965).
3. Hall E. H., Amer. Journ. Math., 2, 287 (1879).
4. Hall E. H., A Dual Theory of Conduction in Metals, Cambridge, Mass., 1938.
5. Slater J. C., Phys. Rev., 76, 1592 (1949).
- 6*. Соколов А. А., Лоскутов Ю. М., Тернов И. М., Квантовая механика, 2-е изд., изд-во «Просвещение», 1965.
- 7*. Слэтер Дж., Электронная структура молекул, изд-во «Мир», 1965.
- 8*. Займан Дж., Электроны и фононы, ИЛ, 1962.
- 9*. Мак-Лахлан Н. В., Теория и приложения функции Матъе, ИЛ, 1953
- 10*. Вопросы квантовой теории необратимых процессов, ИЛ, 1962.
- 11*. Ансельм А. И., Введение в теорию полупроводников, М., 1962.
- 12*. Смит Р., Полупроводники, ИЛ, 1962.
- 13*. Стилбанс Л. С., Физика полупроводников, М., 1967.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

К § 4.

Холл-эффект: [899] (Ge); [900] (Bi); [910—912]; [947] (Te); [948, 949, 969] (PbS, PbSe, PbTe); [981] (InSb, InAs); [982] (InSb); [995—997, 1007—1009, 1013—1017]; [1022] (графит); [1029, 1030]; [1061] (Bi); [1105] (Ge); [1134—1136]; [1140] (InSb); [1165—1168]; [1179] (Ge); [1197] (графит); [1199] (Cu); [1204] (Ge); [1228—1230, 1252—1255, 184]; [1269] (сплавы Cu); [1275] (TiO₂); [1325] (Pb, Cu, Mg); [1326] (Cr); [1330] (Na); [1383] (Pu); 1388 (InSb); [1442, 1443, 1450, 1451] (Ge); [1465]; [1488] (Te); [1539, 1621]; [1628] (Bi); [1642, 1643] (Ag-сплавы); [1763] (щелочи); [1814, 1832, 1833]; [308] (Ag); [1854—1858] (Bi₂Te₃); [309—311, 1896, 1897]; [1940] (Ni—Cu—Fe); [1965] (жидкие металлы); [1977] (Sb); [2002, 2003, 2028—2030, 2045, 2050, 2052]; [2056] (Te); [2057] (GaTe, GaSe); [2080] (Co—Ni); [2081] (пермаллой); [2082] (Fe); [2083] (Ti, V, Cr, Mn); [2084] (Ni₃Mn, Fe—Co); [392—394]; [2097] (Cu, Ag, Au, Pd, Pt, Zr, W, Mo, Ta, Nb, Al, переходные 4d- и 5d-группы); [2106—2108] (InSb); [2109] (InAs); [2114] (Sb); [2134] (Ge); [2169—2170] (Bi); [428]; [2246] (гидриды титана); [2271] (Bi, Bi—Te); [2282, 2283]; [2296—2300] (Ge, Si); [2314] (Ge); [2361, 2367, 2390, 2391, 2410—2414, 450, 2474—2476]; [2502] (Bi₂Se₃); [2503] (InSb); [2599, 2604] (InSb); [2632] (Ge); [2643] (ZnO); [1694, 547] (Bi); [2714]; [2740] (Sb); [2741] (переходные металлы); [2752]; [2765] (Ge, Si); [2788—2790, 2798, 2805]; [2918] (Cu); [2950, 2954—2962, 3017]; [3022] (Bi₂Te₃); [3023, 3025]; [3068] (Ge); [3113, 3114, 3130]; [3163] (Zn, Cd); [3171]; [3192] (Ge, Si); [3264, 3265] (Bi); [3267] (Bi); [3286—3299]; [3304] (графит); [3311]; [3327] (Si); [3340] (Cu, Cu₃Au); [3363] (PbS); [3392] (графит); [3400]; [3444, 3450, 3451, 3462—3464]; [3499] (Bi); [3567] (Si); [3584, 3617, 3690, 3761]; [3762] (Ge); [3770—3772] (Bi); [3820] (Te); [726, 727, 3910, 3973, 4000, 4001]; [4041] (Sb); [4089] (Bi); [4157] (Te); [4226] (Cu—Ni); [4233] (Cr—Fe, Cr—V); [4330] (одновалентные металлы); [4351] (Ge); [4395, 4396, 788—790]; [4416] (графит); [4514, 4562]; [4586] (Bi); (4630) (Au—Cr); [4682, 4686—4688]; [4883] (Ge); [892] (щелочи); [4950, 4951].

ЦИКЛОТРОННЫЙ РЕЗОНАНС И СВЯЗАННЫЕ С НИМ ЭФФЕКТЫ

§ 1. Качественное описание природы циклотронного резонанса

Как мы видели в гл. 2, § 4, эффект Холла может дать ценную информацию об электронах в металле или в полупроводнике. Оказалось, что и некоторые другие позднее открытые эффекты, связанные с наличием магнитного поля, позволяют получить очень много сведений относительно природы энергетических зон; к их числу относятся, в частности, циклотронный резонанс¹⁾ и эффект де Гааза — ван Альфена. В настоящей главе мы остановимся на этих двух и некоторых связанных с ними явлениях и посмотрим, какую информацию они дают относительно зонной структуры. Начнем с описания циклотронного резонанса в рамках простой классической модели, а затем покажем, как эта задача решается для случая реальных кристаллов. Эффект, как предполагает само его название, состоит в явлении резонанса между приложенным электромагнитным полем и вращательным движением электрона, помещенного в постоянное магнитное поле.

Классический электрон с зарядом $-e$ в присутствии постоянного внешнего магнитного поля \mathbf{B} испытывает силу $-e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$, где \mathbf{v} — скорость электрона. Эта сила перпендикулярна магнитному полю; следовательно, поле не действует на компоненту скорости, направленную вдоль него, и она остается постоянной. Что касается движения в плоскости, перпендикулярной полю, т. е. в плоскости, в которой сила отлична от нуля, то в ней электрон описывает круговую орбиту с постоянной угловой скоростью ω , называемой циклотронной частотой. В сказанном легко убедиться элементарным путем. Если R — радиус окружности, то линейная скорость v составляет ωR . Ускорение электрона, направленное к центру окружности, равно $v^2/R = \omega^2 R$. Масса, умноженная на это ускорение, должна быть равна величине силы $e\mathbf{v} \times \mathbf{B} = e\omega R \mathbf{B}$. Таким образом, имеем

$$m\omega^2 R = e\omega R B, \quad \omega = \frac{e}{m} B, \quad (3.1)$$

¹⁾ В советской литературе равно употребителен также термин «диамагнитный резонанс». — *Прим. ред.*

где m — масса электрона. Происхождение термина «циклотронный» связано с тем, что в циклотроне, где движутся положительные ионы в постоянном магнитном поле, угловая частота их вращения определяется тем же выражением с заменой массы электрона на массу иона. Поскольку масса электрона гораздо меньше, циклотронная частота ω , определяемая равенством (3.1), гораздо больше для электронов, чем для ионов.

В циклотроне частицы ускоряют, прикладывая к электродам, или дуантам, радиочастотные импульсы с частотой ω . Частицы непрерывно обращаются по окружности, получая ускорение каждый раз, когда они проходят между дуантами. Поскольку энергия частиц при этом растет, а угловая частота остается неизменной, радиус орбиты увеличивается, так что орбиты представляют собой постепенно раскручивающиеся спирали. Радиус связан с энергией соотношением $E = mv^2/2 = m\omega^2 R^2/2$. Когда он становится достаточно большим, частицы удаляются из пучка, ускоренные до большой энергии. В опытах по циклотронному резонансу электронов подобный же метод используется для ускорения электронов: переменное высокочастотное электрическое поле с частотой ω прикладывается в плоскости, перпендикулярной вектору \mathbf{B} . При этом частицы ускоряются как и в циклотроне, но ускорение наблюдается не путем непосредственного исследования частиц, а косвенно: изменяя частоту электрического поля, мы наблюдаем поглощение высокочастотной мощности, когда частота поля становится равной циклотронной частоте ω . Определяя резонансную частоту экспериментально, можно найти ω .

Цель эксперимента состоит в определении циклотронной частоты, которая для классического электрона, как мы видели из соотношения (3.1), составляет eV/m . Для волнового пакета в кристалле, если его можно описывать с помощью одной эффективной массы, циклотронная частота есть eV/m^* . Таким образом, ее измерение дает нам метод определения эффективной массы. Однако действительно интересные применения этого метода относятся к случаям, когда одной-единственной эффективной массой пользоваться нельзя: выражение для энергии вида (2.11) содержит несколько эффективных масс. Как мы сейчас покажем, исследование циклотронного резонанса позволяет найти вид зависимости энергии от волнового вектора в окрестности максимума или минимума.

Чтобы объяснить, как это делается, предположим, что энергия вблизи минимума может быть представлена квадратичной функцией квазимпульса, но главные оси эллипсоида могут быть и неизвестны. Рассмотрим волновой пакет, который при $t=0$ находится на данной поверхности энергии. Последняя представляет

собой эллипсоид в пространстве квазиимпульсов. Как мы знаем из уравнения (2.5), скорость изменения квазиимпульса равна силе $-e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$, где, согласно (2.3), скорость волнового пакета \mathbf{v} определяется выражением $\mathbf{v} = (1/\hbar \cdot \text{grad}_k E)$, E — энергия, зависящая от волнового вектора \mathbf{k} , а символ grad_k обозначает дифференцирование по компонентам вектора \mathbf{k} . Но градиент E обязательно перпендикулярен к поверхности $E = \text{const}$ (поверхности энергии). Поскольку вектор $(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ перпендикулярен \mathbf{v} , он должен лежать на поверхности энергии. Видим, таким образом, что вектор, изображающий скорость изменения квазиимпульса со временем, расположен тангенциально к поверхности энергии. Отсюда следует, что под действием магнитного поля энергия электрона не изменяется. При движении волнового пакета в периодическом поле дело обстоит в этом смысле так же, как и для свободного электрона: магнитное поле не производит над частицей работы, т. е. оставляет постоянной ее энергию.

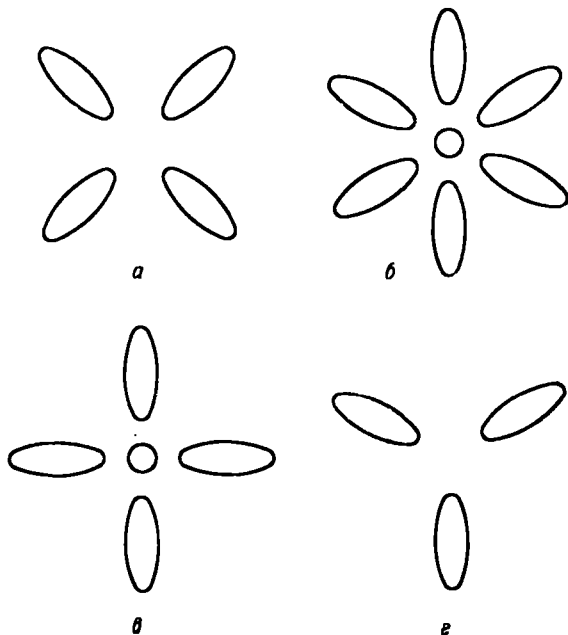
Заметим далее, что вектор $(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ должен быть перпендикулярен магнитной индукции \mathbf{B} . Это позволяет выполнить следующее построение. Проведем плоскость, перпендикулярную вектору \mathbf{B} , которая разрезает эллипсоид постоянной энергии в пространстве квазиимпульсов и проходит через точку этой поверхности энергии, соответствующую положению волнового пакета при $t=0$. Тогда пересечение указанной плоскости и эллипсоида будет представлять собой траекторию волнового пакета в пространстве квазиимпульсов под действием магнитного поля. Это пересечение имеет форму эллипса, и все такие пересечения, соответствующие различным значениям компоненты квазиимпульса в направлении магнитного поля, будут подобными эллипсами. Рассмотрим теперь движение волнового пакета по такому эллипсу. Очевидно, каждому данному эллипсу отвечает определенное время однократного обхода его волновым пакетом. Движение в целом будет периодическим, но задача о вычислении периода при различных эффективных массах [см. (2.11)] довольно сложна; мы решим ее в гл. 3, § 6. Период оказывается одним и тем же независимо от величины компоненты квазиимпульса в направлении поля при условии, что эта компонента достаточно мала, так что еще выполняется квадратичная аппроксимация (2.11). Это следует из простых соображений. Действительно, удвоим линейные размеры эллипса, тогда удвоится и величина v , а потому и производная dp/dt . Вместе с тем, однако, удвоится и периметр эллипса, и, следовательно, для обхода его с удвоенной скоростью понадобится то же самое время. Итак, для данного направления магнитного поля имеется определенное значение циклотронной частоты; оно зависит, однако, от направления поля.

Этих сведений достаточно, чтобы понять, как можно использовать явление циклотронного резонанса для исследования максимумов и минимумов энергетических зон. Проиллюстрируем это на примере, в применении к которому рассматриваемый метод впервые развивался, — на задаче об определении минимума зоны проводимости в германии. Энергетические зоны в германии показаны на фиг. 10.16 книги [24]. Дну зоны проводимости там отвечает точка L зоны Бриллюэна; соответствующая симметрия волновых функций есть L_1 . Как мы помним, эта точка лежит в конце оси $[111]$, на краю зоны Бриллюэна. С другой стороны, имеется минимум зоны Δ_1 в направлении $[100]$, расположенный почти так же низко. Как узнать, какой из этих волновых векторов соответствует меньшей энергии? Ответ был получен не теоретически, а экспериментально, при помощи циклотронного резонанса.

Прежде всего заметим, что если бы минимум энергии находился в точке L , то поверхность постоянной энергии около него состояла бы из восьми эллипсоидов вращения. У каждого эллипсоида одна из осей (как оказалось, — большая) была бы ориентирована вдоль одного из восьми направлений, эквивалентных $[111]$; вследствие симметрии относительно этой оси легко показать, что две другие оси эллипсоида должны быть эквивалентными (в действительности это малые оси эллипсоидов). Таким образом, эллипсоиды были бы сигарообразными; центры их должны были бы находиться в точках L пространства квазиимпульсов. Наложим теперь магнитное поле в направлении оси x . Тогда поверхность, перпендикулярная магнитному полю, пересечет восемь эллипсоидов по четырем эллиптическим кривым, как показано на фиг. 3.1, а. Эти эллипсы будут расположены вдоль четырех направлений, составляющих с главными осями угол 45° . Вследствие одинаковой формы эллипсов время обхода волновым пакетом каждого из них должно быть одним и тем же. Таким образом, магнитному полю, направленному по оси x , будет отвечать единственная циклотронная частота. С другой стороны, в случае поля, ориентированного по направлению $[111]$ ($x = y = z$), картина будет совершенно иной. Как видно из фиг. 3.1, б, мы будем смотреть вдоль большей оси двух эллипсоидов, которые ориентированы по направлениям $[111]$ и $[-1 - 1 - 1]$, в то время как остальные шесть эллипсоидов будут ориентированы по шести направлениям, составляющим между собой углы 60° . Эти шесть эллипсоидов будут пересекаться плоскостями, перпендикулярными магнитному полю, по эллипсам, в то время как два первых будут пересекаться по окружностям. Эллипсы будут соответствовать одной циклотронной частоте, окружности — другой. Таким образом, для магнитного поля, на-

правленного вдоль оси $[111]$, мы должны найти две циклотронные частоты.

Рассмотрим теперь альтернативную ситуацию, при которой минимум энергии в зоне проводимости лежит на оси Δ . При этом



Фиг. 3.1. Схема, иллюстрирующая циклотронный резонанс для электронов на дне зоны проводимости в германии.

Эллипсы соответствуют пересечениям плоскости, перпендикулярной магнитному полю, с эллипсоидальными поверхностями энергии. *a* — магнитное поле направлено вдоль оси x , главные оси эллипсоидальных поверхностей энергии ориентированы вдоль направлений $[111]$; *b* — магнитное поле направлено вдоль оси $[111]$; поверхности энергии такие же, как в *a*; *v, g* — магнитное поле направлено вдоль оси x и вдоль направления $[111]$ соответственно, а главные оси эллипсоидальных поверхностей энергии — вдоль осей $\pm x, \pm y, \pm z$.

изоэнергетическая поверхность вблизи минимума будет представлять собой совокупность шести эллипсоидов — опять сигарообразных, но с осями вдоль направлений $\pm x, \pm y, \pm z$. Если в этом случае магнитное поле направить по оси x , то пересечение плоскости, перпендикулярной полю, с поверхностью энергии даст окружности для двух эллипсоидов, лежащих на направлениях $\pm x$, в то же время для остальных четырех эллипсоидов, как показано на фиг. 3.1, *v*, мы получим четыре эллипса, расположенных под углом 90° друг относительно друга. Следовательно, в этом случае мы должны обнаружить две циклотронные

частоты. Для магнитного поля, направленного вдоль оси [111], напротив, мы увидим только три эллипса одинакового вида, образующие между собой углы 120° , как показано на фиг. 3.1, г. Следовательно, в этом случае мы должны обнаружить только одну циклотронную частоту. Таким образом, две рассмотренные ситуации приводят к прямо противоположным выводам.

Эксперимент [1]¹⁾ решил вопрос в пользу первой гипотезы. Более того, путем весьма тщательного изучения циклотронной частоты в зависимости от ориентации магнитного поля и путем детального развития теории, описанной здесь в общих чертах, было выяснено, что можно получить очень хорошее согласие теории с опытом и найти из опыта значения эффективных масс в различных направлениях. В конкретном случае германия мы имеем две эффективные массы: одну для оси [111] (одной из главных осей эллипсоида), другую — для любой из двух осей, перпендикулярных [111].

§ 2. Задача о движении свободного электрона в магнитном поле. Метод Ландау

Из простых рассуждений предыдущего параграфа мы видели, что опыты по магнитному резонансу позволяют получить подробную информацию относительно энергетических зон. Перейдем теперь к количественному изучению этих вопросов. В качестве первого шага следует рассмотреть теорию движения электронов в магнитном поле, сначала для свободных электронов, затем для электронов в периодическом поле. В этом параграфе мы начнем со случая свободных электронов, используя сначала метод, развитый Ландау [2] в связи с исследованием диамагнетизма металлов.

Гамильтониан электрона с зарядом $-e$ и массой m в магнитном поле, векторный потенциал которого равен A , имеет вид

$$H = \frac{(\mathbf{p} + eA)^2}{2m} \quad (3.2)$$

(см., например, [20], приложение 4). Соответствующий оператор получается обычным путем — заменой \mathbf{p} на оператор $-i\hbar\nabla$. Тогда не зависящее от времени уравнение Шредингера принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{ie\hbar A \cdot \nabla}{m}\psi + \frac{e^2 A^2}{2m}\psi = E\psi. \quad (3.3)$$

¹⁾ Особое внимание в работе [1] следует обратить на фиг. 5, где показаны три циклотронные частоты, вырождающиеся в две в направлении [111] и в одну — в направлении [100].

Здесь E — энергия электрона. Будем считать, что постоянное магнитное поле \mathbf{B} направлено вдоль оси z . Векторный потенциал этого поля можно определить по-разному. Имея в виду соответствие с работой Ландау, положим

$$A_x = A_z = 0, \quad A_y = Bx. \quad (3.4)$$

Это приводит к правильной величине магнитной индукции, определяемой соотношением $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$. Подставляя (3.4) в (3.3), получаем уравнение Шредингера в следующем виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{ie\hbar B}{m} x \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2m} x^2 \psi = E \psi. \quad (3.5)$$

Это уравнение можно решить, полагая

$$\psi = X(x) \exp[i(k_y y + k_z z)]. \quad (3.6)$$

Подставляя полученное выражение в уравнение (3.5), находим

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{e^2 B^2}{2m} \left(x + \frac{k_y \hbar}{eB} \right) X = \left(E - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} \right) X. \quad (3.7)$$

Мы получили уравнение Шредингера для гармонического осциллятора, угловая частота которого ω , как и в равенстве (3.1), определяется выражением eB/m . Поэтому для энергии имеем

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m}, \quad (3.8)$$

где n — квантовое число. Функции $X(x)$ — обычные решения задачи о линейном осцилляторе, но зависящие от аргумента $x + k_y \hbar / eB$, так что для данного k_y центр функции $X(x)$ находится не в начале координат, а в точке $-k_y \hbar / eB$.

Мы видим, что в магнитном поле движение в плоскости xy квантовано. Соответствующие уровни называются уровнями Ландау. Они тесно связаны с циклотронной частотой, определяемой в опытах по циклотронному резонансу. В рамках квантовомеханического подхода мы можем ожидать, что поле излучения с круговой частотой ω вызовет переходы между состояниями с различными значениями квантового числа n . Поскольку мы рассматриваем задачу типа линейного осциллятора, то действует правило отбора, ограничивающее изменения n значениями ± 1 . Следовательно, испущенные или поглощенные фотоны будут иметь энергии $\hbar \omega$, так что угловая частота испускаемого или поглощаемого излучения будет равна ω в согласии с классическим объяснением циклотронного резонанса.

Энергия электрона не зависит от квантового числа k_y , что приводит к многократному вырождению уровней. Чтобы найти

число вырожденных уровней, поместим электрон в прямоугольный ящик с размерами X_1, Y_1, Z_1 вдоль трех координатных осей и воспользуемся периодическими граничными условиями (вместо нулевых). Тогда величина k_y будет принимать значения, для которых $\exp ik_y Y_1 = 1$, т. е.

$$k_y = \frac{2\pi}{Y_1} \times \text{Целое число.} \quad (3.9)$$

Следовательно, величина $k_y \hbar / eV$ принимает значения $\hbar / eV Y_1 \times$ целое число. Это те значения x , которые могут быть центрами функций X . На длине периодичности X_1 число разрешенных значений x равно отношению величины X_1 к расстоянию между этими значениями, т. е.

$$\text{Число вырожденных уровней} = \frac{X_1 Y_1}{\hbar / eV}. \quad (3.10)$$

Другими словами, мы можем расположить параллельно оси y прямоугольные полоски шириной $\hbar / eV Y_1$ в направлении x и длиной Y_1 в направлении y , так что площадь каждой полоски равна \hbar / eV . Каждый уровень как бы приписывается одной из таких полосок. Число вырожденных уровней равно числу полосок, которые можно разместить на площади $X_1 Y_1$ поперечного сечения ящика в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

Рассмотрение, которое мы, следуя методу Ландау, здесь привели, совершенно правильно, но оно не выявляет очевидной связи с круговыми орбитами, о которых мы говорили в гл. 3, § 1. Вследствие высокой степени вырождения мы можем составлять линейные комбинации функций, принадлежащих одной и той же энергии (т. е. одинаковым значениям квантовых чисел n и k_z), получая при этом много альтернативных видов решений. В следующем параграфе мы покажем, что, пользуясь цилиндрическими координатами, можно более непосредственно прийти к картине круговых орбит.

§ 3. Задача о движении свободного электрона в магнитном поле. Цилиндрические координаты

Перейдем от прямоугольных координат (использованных в предыдущем параграфе) к цилиндрическим, r, φ, z . При этом удобнее записать векторный потенциал в виде

$$A_x = -\frac{1}{2} yB, \quad A_y = \frac{1}{2} xB, \quad A_z = 0. \quad (3.11)$$

Формулы (3.11) приводят к тому же значению магнитного поля, что и векторный потенциал (3.4). Подставляя (3.11) в уравне-

ние Шредингера (3.3), получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{ie\hbar B}{2m} \left(-y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi + \frac{e^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \psi = E\psi, \quad (3.12)$$

или в цилиндрических координатах

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{ie\hbar B}{2m} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2}{8m} r^2 \psi = E\psi. \quad (3.13)$$

Теперь мы можем искать решение в виде

$$\psi = R(r) \exp(ij\varphi) \exp(ik_z z), \quad (3.14)$$

где j , как всегда в задачах с цилиндрической симметрией, должно быть целым числом. Подставляя это выражение в уравнение (3.13), получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{j^2}{r^2} R \right) + \frac{e^2 B^2}{8m} r^2 R = \left(E - \frac{e\hbar j B}{2m} - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} \right) R. \quad (3.15)$$

Чтобы решить это уравнение, воспользуемся методом, предложенным Фоком [3] для решения задачи о линейном осцилляторе в магнитном поле (она приводится к уравнению Шредингера того же вида). К рассматриваемой задаче этот метод был применен позднее Динглом [4]. Его изложение содержится в приложении 3. В результате получают следующие собственные функции:

$$R = r^j \exp\left(-\frac{\pi e B}{2\hbar} r^2\right) \left[B_0 + B_1 \frac{\pi r^2 e B}{\hbar} + B_2 \left(\frac{\pi r^2 e B}{\hbar}\right)^2 + \dots + B_n \left(\frac{\pi r^2 e B}{\hbar}\right)^n \right], \quad (3.16)$$

где n — целое число и

$$B_s = -B_{s-1} \frac{4(n+1-s)}{(j+2s-1)(j+2s+1) - (j-1)(j+1)}. \quad (3.17)$$

Собственные значения определяются выражением

$$E = \left(n + j + \frac{1}{2} \right) \frac{e\hbar B}{m} + \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m}. \quad (3.18)$$

Энергия, которую мы нашли, согласуется со значением (3.8), если целое число $n + j$ отождествить с целым числом n из (3.8). Волновые функции, однако, имеют другой вид. Из общих принципов известно, что любую волновую функцию, соответствующую данной энергии, можно представить как линейную комбинацию функций, принадлежащих той же энергии и определенных по методу Ландау, но эта комбинация может быть чрезвычайно сложной. Настоящий метод избавляет от необходимости явно ее определять.

Рассмотрим теперь основные черты полученного решения. Зависимость от угла φ , как и в любой задаче с цилиндрической симметрией, задается множителем $\exp(ij\varphi)$. Радиальная волновая функция R имеет узлы, так как содержит полином; всего имеется n узлов. Так же, как в задаче об атоме водорода, классической круговой орбите соответствует волновая функция, для которой радиальное квантовое число n равно нулю. Другими словами, для круговой орбиты имеем

$$R = r^j \exp\left(-\frac{\pi eB}{2h} r^2\right). \quad (3.19)$$

Эта функция обладает резким максимумом при некотором значении r , вблизи этого максимума ее можно приближенно представить в виде функции Гаусса. Для этой цели нужно, как обычно, разложить $\ln R$ в степенной ряд около точки максимума. Получаем

$$\begin{aligned} \ln R &= j \ln r - \frac{\pi eB}{2h} r^2, \\ \frac{d \ln R}{dr} &= \frac{j}{r} - \frac{\pi eB}{h} r, \\ \frac{d^2 \ln R}{dr^2} &= -\frac{j}{r^2} - \frac{\pi eB}{h}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Первая производная $d \ln R/dr$ обращается в нуль, если

$$\pi r^2 = \frac{j\hbar}{eB}. \quad (3.21)$$

Это означает, что площадь орбиты (если понимать под орбитой окружность радиуса r , на которой волновая функция имеет максимум) содержит j фундаментальных единиц \hbar/eB , введенных в предыдущем параграфе. Для этого значения r вторая производная есть $-2\pi eB/\hbar$. Следовательно, мы можем записать первые члены разложения $\ln R$ в ряд Тэйлора в виде

$$\ln R = \text{const} - \frac{\pi eB}{h} \left(r - \sqrt{\frac{j\hbar}{\pi eB}} \right)^2 + \dots \quad (3.22)$$

Взяв экспоненту от этой величины, приближенно получаем

$$R = \exp\left[-\frac{\pi eB}{h} \left(r - \sqrt{\frac{j\hbar}{\pi eB}} \right)^2\right] \times \text{const}. \quad (3.23)$$

Это есть функция Гаусса с максимумом в точке r , определенной равенством (3.21).

Функция (3.23) приближенно совпадает с истинной волновой функцией при $n = 0$. Она была бы точной волновой функцией основного состояния линейного осциллятора, потенциальная

энергия которого имеет минимум при $r = \sqrt{j\hbar/\pi eB}$, а угловая частота равна циклотронной частоте. Действительно, волновая функция, описывающая состояние осциллятора, имеет вид $\exp[-(\pi m \omega / \hbar) x^2]$, где x — смещение, m — масса, ω — угловая частота. Это выражение совпадет с (3.23), если положить $\omega = eB/m$. Почему мы имеем такую связь, можно понять, рассматривая уравнение (3.15) в предельном случае больших значений квантового числа j .

Именно в пределе больших j волновая функция будет сконцентрирована вблизи окружности, радиус которой определен равенством (3.21) и, следовательно, велик. В этом пределе в уравнении (3.15) можно пренебречь членом $(1/r)(dR/dr)$ по сравнению с членом d^2R/dr^2 . Далее, эффективную потенциальную энергию

$$\frac{\hbar^2 j^2}{2mr^2} + \frac{e^2 B^2}{8m} r^2 \quad (3.24)$$

можно разложить в степенной ряд в окрестности минимума; с точностью до членов второго порядка получим

$$\frac{e\hbar j B}{2m} + \frac{1}{2} \frac{e^2 B^2}{m} \left(r - \sqrt{\frac{j\hbar}{\pi e B}} \right)^2. \quad (3.25)$$

С точностью до аддитивного члена $e\hbar j B/2m$ это есть потенциальная энергия линейного осциллятора с угловой частотой $\omega = eB/m$ и центром при $r = \sqrt{j\hbar/\pi e B}$. Поэтому вполне естественно, что волновая функция основного состояния должна отвечать такому осциллятору. Более того, энергия основного состояния осциллятора дает правильное значение энергии для нашей задачи. Из уравнения (3.15) следует, что энергия E равна $(e\hbar j B/2m) + (k_z^2 \hbar^2 / 2m)$ плюс энергия линейного осциллятора. Последняя вносит дополнительный член $e\hbar j B/2m$, добавляющийся к аналогичному члену, уже присутствующему, и энергию основного состояния осциллятора $1/2 \hbar \omega$. В результате мы получаем для энергии величину $(j + 1/2) \hbar \omega + (k_z^2 \hbar^2 / 2m)$, чего и следовало ожидать.

Решение задачи об осцилляторе дает не только состояние радиальной задачи с $n = 0$, но и возбужденные состояния. Из выражения (3.16) видно, что состояния с $n \neq 0$ описываются функциями, которые можно аппроксимировать гауссовой функцией (3.23), умноженной на полиномы степени n . Такой же вид имеет и волновая функция линейного осциллятора, отвечающая квантовому числу n . Более того, исследование полиномов в выражении (3.16) и сравнение их с полиномами, получающимися в задаче о линейном осцилляторе, показывают, что в пределе больших j они совпадают. Энергия линейного осциллятора,

разумеется, точно приводит к выражению (3.18). Иначе говоря, аппроксимация линейного осциллятора для решения уравнения (3.15) дает точные значения энергетических уровней, но только приближенно верные волновые функции. Однако в пределе больших r или больших j волновые функции также близки к точным предельным значениям.

Волновая функция, которую мы получили для $n = 0$, соответствует круговой орбите классического движения электрона в магнитном поле. Мы отметили, что энергия электрона составляет $(j + 1/2) \hbar\omega + (k_z^2 \hbar^2 / 2m)$, а площадь орбиты равна $j\hbar/eB$. Соотношение между этими двумя величинами согласуется с классическим, если пренебречь аддитивной константой $1/2$. Действительно, в § 1 мы нашли, что энергия E связана с радиусом орбиты R равенством

$$E = \frac{m\omega^2 R^2}{2}. \quad (3.26)$$

В этом выражении энергия $k_z^2 \hbar^2 / 2m$ поступательного движения вдоль оси z была опущена. Заменяя энергию величиной $j\hbar\omega$, а площадь πR^2 величиной $j\hbar/eB$ и вспоминая определение частоты ω , видим, что эти величины удовлетворяют соотношению (3.26).

Волновые функции для $n \neq 0$ не соответствуют круговым орбитам, окружающим начало координат. Здесь следует вспомнить о высокой степени вырождения, на которую указывалось ранее. Эти волновые функции в отличие от круговой орбиты при $n = 0$ не соответствуют непосредственно классическим орбитам. Они составляют скорее большее число вырожденных функций, из которых можно было бы построить линейные комбинации, соответствующие круговым орбитам с центрами, расположенными не в начале координат, а в других точках. Прямая связь с классической круговой орбитой имеется только в случае $n = 0$.

Можно спросить: почему предпочтительно выбрать именно рассмотренный выше тип решений? Если мы составим волновой пакет из функций, отвечающих приближенно данной энергии, то он будет вращаться по соответствующей окружности в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, с циклотронной частотой так, как двигалась бы классическая частица, независимо от того, какого типа функциями мы пользуемся. Можно было бы, например, использовать и функции Ландау. При этом, однако, построение волнового пакета оказалось бы довольно сложным, и мы не смогли бы интуитивно предсказать ожидаемый результат. В случае же цилиндрического решения, напротив, уже одна функция для данного j , соответствующая $n=0$, дает очень хорошее первое приближение для волнового пакета

кругового типа. Она уже локализована, если говорить только о радиусе. Чтобы локализовать ее в направлении z , следует взять суперпозицию таких волн с различными, но близко расположенными значениями k_z ; взяв волны с различными, но близлежащими значениями j , мы получим состояние, локализованное относительно угла φ . Последнее необходимо, чтобы получить волновой пакет, относительно сконцентрированный по фазе, так, чтобы внешнее электрическое поле частоты ω могло резонировать с ним и вызвать поглощение энергии пакетом. Чтобы получить желаемый волновой пакет, мы должны были бы также обычным образом использовать суперпозицию волн со значениями l , близкими к нулю. Но в результате мы получили бы нечто очень похожее на пакет, вращающийся вокруг круговой волновой функции, даваемой нашим решением при $l = 0$. Другими словами, эта форма решения удобна потому, что она дает хорошую физическую картину волновой функции, соответствующей классической круговой орбите, так же, как для атома водорода волновая функция с нулевым значением радиального квантового числа подобна классической круговой боровской орбите.

Теперь, когда мы получили волновые функции для круговых орбит, отметим один очень интересный факт, на который указал Онзагер [5]: как видно из (3.21), площади круговых орбит квантованы, они содержат целое число фундаментальных единиц h/eB . Это утверждение, конечно, нельзя понимать абсолютно строго, так как не существует строгого способа определения радиуса волновой функции, но если определить его как радиус, на котором волновая функция принимает максимальное значение, что мы сделали при выводе равенства (3.21), то высказанное утверждение будет справедливо. Онзагер формулирует этот результат несколько иначе. Он замечает, что поток магнитной индукции через орбиту равен охватываемой ею площади, умноженной на величину магнитной индукции (коль скоро вектор индукции нормален к плоскости орбиты). Следовательно, согласно (3.21), этот поток, равный $\pi r^2 B$, составляет jh/e , т. е.

$$\text{Магнитный поток через орбиту} = \frac{jh}{e}. \quad (3.27)$$

Эта теорема Онзагера, как мы увидим в следующем параграфе, оказывается очень важной, поскольку она справедлива как для электронов в свободном пространстве, так и для электронов, движущихся в периодическом поле. Это — фундаментальное свойство электронных орбит в магнитном поле.

В случае круговых орбит с площадью, определяемой выражением (3.21), вполне можно приписать каждой орбите площадь h/eB , т. е. площадь кольца, заключенного между двумя

окружностями, соответствующими двум последовательным значениям целого числа j . Степень вырождения состояний с данной энергией, конечно, должна быть такой же, как и в методе Ландау. Таким образом, как и раньше, мы находим число вырожденных уровней, определяя, сколько раз площадь h/eB укладывается в поперечном сечении ящика.

§ 4. Связь теоремы Онзагера с условием квантования

Рассматривая соотношение (3.27), мы уже упоминали о фундаментальной роли теоремы Онзагера, утверждающей, что величина магнитного потока через орбиту составляет $j\hbar/e$, где j есть квантовое число. Эта теорема остается справедливой и для электронов, находящихся под действием периодического потенциала. Рассматривая ее более подробно, покажем прежде всего, что для свободных электронов существует тесная связь между соотношением (3.27) и условием квантования Зоммерфельда. Фактически мы найдем, что интеграл $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$, взятый по орбите, равен $j\hbar$ и что это соотношение эквивалентно (3.27).

Рассматривая это соотношение, следует помнить, что связь между импульсом и скоростью в присутствии магнитного поля не так проста, как в отсутствие его. Согласно одному из уравнений Гамильтона, мы имеем

$$\frac{dx}{dt} = v_x = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x + eA_x}{m} \quad (3.28)$$

(аналогично — для v_y и v_z). Рассмотрим классическое движение по окружности радиуса R с центром в начале координат. Имеем $x = R \cos \omega t$, $y = R \sin \omega t$, $v_x = dx/dt = -\omega R \sin \omega t$, $v_y = \omega R \cos \omega t$. Далее, $A_x = -yB/2 = -(RB/2) \sin \omega t$, $A_y = xB/2 = (RB/2) \cos \omega t$. Следовательно,

$$\begin{aligned} p_x &= mv_x - eA_x = \left(-m\omega R + \frac{eRB}{2} \right) \sin \omega t = \\ &= \left(-eRB + \frac{eRB}{2} \right) \sin \omega t = -\frac{eRB}{2} \sin \omega t, \\ p_y &= mv_y - eA_y = \left(m\omega R - \frac{eRB}{2} \right) \cos \omega t = \\ &= \left(eRB - \frac{eRB}{2} \right) \cos \omega t = \left(\frac{eRB}{2} \right) \cos \omega t. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Используем теперь эти результаты для вычисления интеграла $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \oint \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} dt$. Последний представляет собой сумму величин $\oint p_x dx$ и $\oint p_y dy$; следует ожидать, что он квантован

в соответствии с правилом Зоммерфельда (причину этого мы рассмотрим позже). Имеем

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{v} = p_x v_x + p_y v_y = \frac{eRB}{2} \omega R (\sin^2 \omega t + \cos^2 \omega t) = \frac{eR^2 B \omega}{2}. \quad (3.30)$$

Поскольку эта величина — постоянная, интеграл от нее по t за время полного цикла равен ее значению, умноженному на период вращения $2\pi/\omega$. Таким образом,

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \frac{eR^2 B \omega}{2} \frac{2\pi}{\omega} = \pi R^2 e B. \quad (3.31)$$

Полагая этот интеграл равным $j\hbar$, получаем

$$\pi R^2 = \frac{j\hbar}{eB} \quad (3.32)$$

в согласии с (3.21).

Можно было бы спросить: почему, собственно, должно выполняться условие квантования Зоммерфельда в таком виде? Для ответа вспомним, в чем состоит фундаментальный смысл этого соотношения: оно утверждает, что на орбите должно укладываться целое число длин волн. Согласно соотношению де Бройля, импульс равен \hbar/λ , где λ — длина волны. Следовательно, интеграл $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$ есть не что иное, как умноженное на \hbar число длин волн, укладываемых на орбите. Отсюда сразу следует условие квантования. Это соотношение справедливо как в магнитном поле, так и без него. Независимо от того, имеется или нет магнитное поле, мы заменяем импульс \mathbf{p} оператором $-i\hbar\nabla$. Если теперь волновая функция имеет вид $\exp(2\pi i x/\lambda)$, где x — расстояние вдоль орбиты, то оператор \mathbf{p} в применении к ней воспроизводит ту же функцию, умноженную на \hbar/λ . Этот результат не зависит от наличия или отсутствия магнитного поля. В данном случае квантовое число j измеряет число длин волн, укладываемых на окружности. Это сразу явствует из вида волновой функции в цилиндрических координатах: последняя, как мы получили, зависит от угла φ через экспоненту $\exp(ij\varphi)$, показывающую, что при увеличении угла φ на 2π волновая функция проходит j периодов гармонических колебаний.

Теперь, уяснив себе фундаментальное значение соотношения Онзагера, мы можем ожидать, что оно окажется справедливым и в случаях более общих, чем задача о свободном электроде. Фактически дело именно так и обстоит, и использование этого соотношения дает нам ключ к приближенному рассмотрению электронов, находящихся в поле периодического потенциала и в магнитном поле. Точное решение уравнения Шредингера

в этом случае в отличие от задачи о свободном электроне чрезвычайно сложно, и мы не будем даже пытаться его рассматривать. Однако использование условия квантования Зоммерфельда проходит здесь так же просто, как и для свободных электронов. Результаты, которые при этом получаются, для большинства целей достаточны и так же точны, как и обычно при таком подходе. Действительно, условие Зоммерфельда может дать нам информацию об энергетических уровнях, правильную с точностью до одной возможной неоднозначности; остается неясным, следует ли использовать целое или полуцелое число h или условие квантования точно не выполняется вообще ни с целым, ни с полуцелым числом h . Можно ожидать, что ошибка не превышает указанной, и этого оказывается достаточно, чтобы получить много ценных результатов относительно движения электронов в поле периодического потенциала и в магнитном поле. Эта задача рассматривается в следующем параграфе.

§ 5. Теорема Онзагера для периодического потенциала

Применим выводы предыдущего параграфа к случаю, когда электрон движется в поле периодического потенциала и в постоянном магнитном поле. Будем исходить из уравнения (2.5), записав его в виде

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e [\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})]. \quad (3.33)$$

Это соотношение означает, что скорость изменения величины $\hbar\mathbf{k}$ со временем определяется классической силой, действующей на электрон. Вспомним, что именно это равенство дает и ускорение волнового пакета. В данном случае электрическое поле отсутствует, так что мы можем переписать уравнение (3.33) в виде

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \right), \quad (3.34)$$

где скорость волнового пакета \mathbf{v} заменена на $d\mathbf{r}/dt$, а \mathbf{r} есть радиус-вектор волнового пакета. Поскольку вектор индукции \mathbf{B} постоянен, уравнение (3.34) можно проинтегрировать по времени. Получим

$$\hbar\mathbf{k} = -e [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{B}] \times \hbar\mathbf{k}_0. \quad (3.35)$$

Здесь \mathbf{r}_0 и \mathbf{k}_0 — постоянные интегрирования, смысл которых мы сейчас исследуем.

Величина $\hbar\mathbf{k}_0$ есть постоянная компонента квазиимпульса. Величина \mathbf{r}_0 имеет ту же компоненту вдоль направления \mathbf{B} , что и \mathbf{r} , так что разность $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ перпендикулярна \mathbf{B} . Компонента \mathbf{r}_0 ,

перпендикулярная \mathbf{B} , произвольна по величине, но не зависит от времени, позволяя центру орбиты находиться в любой точке пространства. Мы видим, что вектор скорости $d\mathbf{r}_0/dt$ параллелен \mathbf{B} и не дает вклада в $d\mathbf{k}/dt$. Это есть дрейфовая скорость электрона вдоль направления поля, ответственная за установление геликоидального движения. Вектор же $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ дает именно ту проекцию орбиты на плоскость, перпендикулярную полю, которая нужна для применения теоремы Онзагера.

Из равенства (3.35) видно, что вектор $\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ (компонента радиуса-вектора в пространстве квазимпульсов, перпендикулярная магнитному полю) перпендикулярен и вектору $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ — проекции радиуса-вектора в обычном пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Отсюда непосредственно следует, что орбита волнового пакета в \mathbf{k} -пространстве подобна проекции орбиты в обычном пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю, но повернута на 90° вокруг направления магнитного поля; площади орбит связаны соотношением

$$\text{Площадь орбиты в } \mathbf{k}\text{-пространстве} = \frac{e^2 B^2}{\hbar^2} \times \\ \times \text{Площадь проекции орбиты в обычном пространстве.} \quad (3.36)$$

Вычислим теперь интеграл $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$, который, как мы видели в предыдущем параграфе, должен быть равен $j\hbar$, где j — квантовое число. Интеграл следует взять вдоль проекции орбиты на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Согласно приложению 1,

$$\hbar\mathbf{k} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}. \quad (3.37)$$

Следовательно, необходимо найти интеграл $\oint (\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{r}$. Согласно (3.35), $\hbar\mathbf{k} = -e[(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{B}] + \hbar\mathbf{k}_0$. Во втором слагаемом под знаком интеграла вектор-потенциал вида $A_x = yB/2$, $A_y = xB/2$, $A_z = 0$ [см. (3.11)] можно заменить на

$$\mathbf{A} = -\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{B}}{2}, \quad e\mathbf{A} = -\frac{e}{2} [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{B}]. \quad (3.38)$$

Это выражение отличается от прежнего на постоянный вектор $(\mathbf{r}_0 \times \mathbf{B})/2$, не меняющий значения магнитной индукции. Выражение (3.38) позволяет рассматривать магнитное поле, ориентированное в любом направлении, а не только вдоль оси z . Таким образом, подынтегральное выражение $\hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}$ принимает вид $\hbar\mathbf{k}_0 - (e/2)[(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{B}]$ (поскольку слагаемое $e\mathbf{A}$ составляет половину члена, содержащегося в $\hbar\mathbf{k}$). Величина $\hbar\mathbf{k}_0$ не дает

вклада в интеграл, так как вектор \mathbf{k}_0 перпендикулярен $d\mathbf{r}$. Следовательно,

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = -\frac{e}{2} \oint [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \mathbf{B}] \cdot d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (3.39)$$

Согласно известному соотношению векторной алгебры, это выражение можно переписать в виде

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = \frac{e}{2} \mathbf{B} \cdot \oint [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]. \quad (3.40)$$

Интеграл $\frac{1}{2} \oint [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]$ равен по величине площади проекции орбиты в обычном пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Действительно, как известно из векторной алгебры, величина $\frac{1}{2} [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]$ есть площадь треугольника, образованного векторами $\mathbf{r} - \mathbf{r}_0$ и $d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$; сумма площадей всех таких треугольников как раз и составляет площадь орбиты. Величина $\frac{1}{2} \oint [(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]$ есть вектор, перпендикулярный плоскости орбиты и потому параллельный \mathbf{B} . Поэтому скалярное произведение в (3.40) равно простому произведению \mathbf{B} на площадь орбиты. Следовательно,

$$\text{Площадь орбиты в обычном пространстве} = \frac{\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}}{eB} = \frac{j\hbar}{eB}, \quad (3.41)$$

где мы положили фазовый интеграл $\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r}$ равным $j\hbar$, как и в случае свободных электронов. Выражение (3.41) есть обобщение (3.32) на случай движения электронов в поле периодического потенциала, подтверждающее универсальный характер теоремы Онзагера.

С помощью (3.36) можно придать выражению (3.41) вид, содержащий площадь орбиты в \mathbf{k} -пространстве. Получим

$$\text{Площадь орбиты в } \mathbf{k}\text{-пространстве} = \frac{2\pi j e B}{\hbar}, \quad (3.42)$$

где, как всегда, j есть целое число. Из дальнейшего будет видно, что это соотношение имеет фундаментальное значение для эффекта де Гааза — ван Альфена.

§ 6. Циклотронная частота в случае эллипсоидальных поверхностей энергии

Обратимся теперь к случаю, когда поверхности энергии в \mathbf{k} -пространстве могут быть аппроксимированы квадратичным выражением типа (2.11), и найдем для него циклотронную частоту.

Положим

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right), \quad (3.43)$$

где за нулевую энергию принято положение дна зоны проводимости, а координатные оси направлены вдоль главных осей эллипсоида. Последние могут оказаться и повернутыми относительно кристаллических осей, которыми естественно воспользоваться, рассматривая свойства симметрии кристалла. Ориентация магнитного поля будем считать произвольной.

Вспомним, что площадь треугольника, образованного векторами $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ и $d(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$, составляет $1/2[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \times d(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)]$ и что, интегрируя это выражение по всей орбите, мы получаем площадь орбиты в \mathbf{k} -пространстве. Согласно уравнению (3.33), $\hbar d(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)/dt = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$. Таким образом,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \times \frac{d(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}{dt} \right] &= -\frac{e}{2\hbar} [(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B})] = \\ &= -\frac{e}{2\hbar} \{ \mathbf{v} [(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{B}] - \mathbf{B} [(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{v}] \}, \end{aligned} \quad (3.44)$$

где использовано известное векторное тождество. Поскольку вектор $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ перпендикулярен \mathbf{B} , первое слагаемое в правой части обращается в нуль и уравнение (3.44) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \times \frac{d(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}{dt} \right] &= \frac{eB}{2\hbar} [(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{v}] = \\ &= \frac{eB}{2\hbar^2} \left[(k - k_0)_x \frac{\partial E}{\partial k_x} + (k - k_0)_y \frac{\partial E}{\partial k_y} + (k - k_0)_z \frac{\partial E}{\partial k_z} \right] = \\ &= \frac{eBE}{\hbar^2} - \frac{eB}{2} \left(\frac{k_{0x}k_x}{m_x} - \frac{k_{0y}k_y}{m_y} - \frac{k_{0z}k_z}{m_z} \right). \end{aligned} \quad (3.45)$$

Мы здесь использовали соотношение (2.3): $\mathbf{v} = (1/\hbar) \text{grad}_{\mathbf{k}} E$.

Проинтегрируем теперь уравнение (3.45) по времени за период. При этом в левой части мы получим площадь орбиты в \mathbf{k} -пространстве. Первый постоянный член в правой части, eBE/\hbar^2 , умножится на период $2\pi/\omega$, где ω — циклотронная частота. Остальные члены справа зависят от времени и потому заменяются своими средними значениями, умноженными на $2\pi/\omega$. Заметим, что k_0 есть среднее по времени значение k . Следовательно, разрешая полученное выражение относительно энергии, мы имеем

$$\begin{aligned} E &= \frac{\omega \hbar^2}{2\pi eB} \times \text{Площадь орбиты в } \mathbf{k}\text{-пространстве} + \\ &+ \hbar^2 \left(\frac{k_{0x}^2}{2m_x} + \frac{k_{0y}^2}{2m_y} + \frac{k_{0z}^2}{2m_z} \right) = j\hbar\omega + \hbar^2 \left(\frac{k_{0x}^2}{2m_x} + \frac{k_{0y}^2}{2m_y} + \frac{k_{0z}^2}{2m_z} \right), \end{aligned} \quad (3.46)$$

где использовано равенство (3.42). Первый член в правой части (3.46) представляет собой квантованную энергию, обусловленную движением в плоскости, перпендикулярной магнитному полю; остальные члены описывают кинетическую энергию движения вдоль направления \mathbf{B} .

Рассматривая уравнение (3.46), следует отметить в первую очередь, что энергия связана с циклотронной частотой соотношением вида (3.8), т. е. так же, как и в использованном Ландау случае свободных электронов. Угловая частота ω здесь, как и раньше, есть циклотронная частота, j — квантовое число, но, поскольку мы использовали не волновую механику, а условие квантования Зоммерфельда, мы не получили полуполого квантового числа, соответствующего величине $(n + 1/2)$ в (3.8); в выражение (3.46) следовало бы внести соответствующее изменение. Далее, по аналогии с (3.1) мы можем эффективную массу m^* , связанную с циклотронной частотой для произвольной ориентации магнитного поля, определить выражением $\omega = eB/m^*$. Можно также ввести вторую эффективную массу m^{**} , определив ее так, чтобы последние члены в выражении для энергии (3.46), обусловленные дрейфовой скоростью, могли быть записаны в виде $\hbar^2 k_0^2 / 2m^{**}$. С помощью этих двух эффективных масс равенство (3.46) можно переписать в виде

$$E = j \frac{eB\hbar}{m^*} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^{**}}; \quad (3.47)$$

квантовое число j здесь следовало бы заменить на $(j + 1/2)$, учитывая, что волновая механика дает полуполые квантовые числа.

Следующая задача состоит в том, чтобы найти зависимость эффективных масс m^* и m^{**} от направления магнитного поля. Пусть направляющие косинусы магнитного поля суть α , β и γ . Тогда, как мы покажем, эти эффективные массы определяются выражениями¹⁾

$$m^* = \sqrt{\frac{m_x m_y m_z}{\alpha^2 m_x + \beta^2 m_y + \gamma^2 m_z}}, \quad (3.48)$$

$$m^{**} = \frac{\alpha^2 m_x^2 + \beta^2 m_y^2 + \gamma^2 m_z^2}{\alpha^2 m_x + \beta^2 m_y + \gamma^2 m_z}.$$

Для вывода этих формул запишем прежде всего уравнения движения в \mathbf{k} -пространстве (3.34), представляя в них скорость

¹⁾ Вывод формулы для m^* и ее применение к задаче о циклотронном резонансе см. в работе Шошли [6].

$\mathbf{v} = (1/\hbar) \text{grad}_{\mathbf{k}} E$, где E определяется соотношением (3.43).
Имеем

$$\begin{aligned} \frac{dk_x}{dt} &= -eB \left(\frac{k_y}{m_y} \gamma - \frac{k_z}{m_z} \beta \right), \\ \frac{dk_y}{dt} &= -eB \left(\frac{k_z}{m_z} \alpha - \frac{k_x}{m_x} \gamma \right), \\ \frac{dk_z}{dt} &= -eB \left(\frac{k_x}{m_x} \beta - \frac{k_y}{m_y} \alpha \right). \end{aligned} \quad (3.49)$$

Рассмотрим случай, когда квазиимпульс постоянен, т. е. эллиптическое движение отсутствует, так что площадь орбиты в \mathbf{k} -пространстве, входящая в (3.46), равна нулю. Чтобы квазиимпульс не зависел от времени, правая часть каждого из уравнений (3.49) должна быть равна нулю. Очевидно, это будет выполняться при условии

$$\frac{k_{0x}}{m_x} : \frac{k_{0y}}{m_y} : \frac{k_{0z}}{m_z} = \alpha : \beta : \gamma. \quad (3.50)$$

Отсюда следует, что постоянный квазиимпульс не параллелен магнитному полю; в противном случае в отношении $\alpha : \beta : \gamma$ находились бы сами компоненты k_{0x} , k_{0y} , k_{0z} , а не величины k_{0x}/m_x , k_{0y}/m_y и k_{0z}/m_z . Причина этого проста. В случае эллипсоидальной поверхности энергии, определяемой формулой (3.43), скорость, вообще говоря, не параллельна квазиимпульсу. Скорость, которая определяется выражением $\mathbf{v} = (1/\hbar) \text{grad}_{\mathbf{k}} E$, имеет компоненты $\hbar k_{0x}/m_x$, $\hbar k_{0y}/m_y$, $\hbar k_{0z}/m_z$. Согласно (3.50), эти компоненты находятся в отношении $\alpha : \beta : \gamma$, так что именно скорость, а не квазиимпульс параллельна вектору \mathbf{B} , как того и требует условие обращения в нуль векторного произведения $(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ при постоянном квазиимпульсе. Величина скорости составляет $\hbar \mathbf{k}_0/m^{**}$.

Попробуем удовлетворить условиям (3.50), полагая

$$k_{0x} = \alpha m_x C, \quad k_{0y} = \beta m_y C, \quad k_{0z} = \gamma m_z C, \quad (3.51)$$

где C — постоянная. Получим

$$\begin{aligned} k_{0x}^2 + k_{0y}^2 + k_{0z}^2 &= (\alpha^2 m_x^2 + \beta^2 m_y^2 + \gamma^2 m_z^2) C^2, \\ \frac{k_{0x}^2}{m_x^2} + \frac{k_{0y}^2}{m_y^2} + \frac{k_{0z}^2}{m_z^2} &= (\alpha^2 m_x + \beta^2 m_y + \gamma^2 m_z) C^2, \\ \frac{k_{0x}^2}{m_x^2} + \frac{k_{0y}^2}{m_y^2} + \frac{k_{0z}^2}{m_z^2} &= (\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2) C^2 = C^2. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Отсюда с помощью (3.52) для второго слагаемого в выражении (3.46) (вклада дрейфовой скорости в кинетическую энергию) находим

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_{0x}^2}{m_x} + \frac{k_{0y}^2}{m_y} + \frac{k_{0z}^2}{m_z} \right) &= \frac{\hbar^2}{2} (\alpha^2 m_x + \beta^2 m_y + \gamma^2 m_z) C^2 = \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \frac{\alpha^2 m_x + \beta^2 m_y + \gamma^2 m_z}{\alpha^2 m_x^2 + \beta^2 m_y^2 + \gamma^2 m_z^2} (k_{0x}^2 + k_{0y}^2 + k_{0z}^2) = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^{**}}, \end{aligned} \quad (3.53)$$

где величина m^{**} определена соотношением (3.48). Таким образом, эту часть выражения (3.47) мы проверили.

Обратимся теперь к циклотронной частоте и к определению циклотронной массы m^* . Пусть квазиимпульс складывается из постоянной величины, которую мы только что рассмотрели, и части, зависящей от времени. В качестве последней возьмем вектор, который вращается в k -пространстве, описывая эллипс, получаемый пересечением поверхности энергии (3.43) с плоскостью, соответствующей постоянной продольной компоненте квазиимпульса p_0 . Очевидно, постоянная составляющая квазиимпульса не дает вклада ни в одну из частей уравнений (3.49). Поэтому их можно считать уравнениями для зависящих от времени компонент квазиимпульса. Если бы все массы были одинаковыми, $m_x = m_y = m_z$, то уравнения (3.49) перешли бы в уравнения движения свободного электрона в магнитном поле, уже решенные нами. Способ, который мы применим, состоит в сведении уравнений (3.49) к этому виду. Положим

$$\begin{aligned} k'_x &= \frac{k_x}{\sqrt{m_x}}, & \frac{\alpha'}{m^*} &= \frac{\alpha}{\sqrt{m_y m_z}}, \\ k'_y &= \frac{k_y}{\sqrt{m_y}}, & \frac{\beta'}{m^*} &= \frac{\beta}{\sqrt{m_z m_x}}, \\ k'_z &= \frac{k_z}{\sqrt{m_z}}, & \frac{\gamma'}{m^*} &= \frac{\gamma}{\sqrt{m_x m_y}}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

После такой замены уравнения (3.49) преобразуются к виду

$$\frac{dk'_x}{dt} = -\frac{eB}{m^*} (k'_y \gamma' - k'_z \beta') \quad (3.55)$$

(аналогично для двух других компонент). Уравнения (3.55) имеют требуемый вид (с эффективной массой m^*), если только величины α' , β' , γ' можно рассматривать как направляющие

косинусы. Последнее означает, что сумма квадратов этих величин должна равняться единице. Тогда

$$\frac{1}{(m^*)^2} = \frac{\alpha^2 m_x + \beta^2 m_y + \gamma^2 m_z}{m_x m_y m_z} \quad (3.56)$$

в согласии с определением (3.48). Тем самым завершается доказательство правильности последних соотношений.

§ 7. Частота циклотронного резонанса для общего случая периодического потенциала

В предыдущем параграфе мы обсудили частный случай эллипсоидальной поверхности энергии. Важно рассмотреть циклотронную частоту и связанные с ней задачи для произвольных поверхностей энергии. К счастью, для вычисления циклотронной частоты в общем случае можно применить квантовомеханический принцип соответствия. Прежде всего мы приведем полученные выше результаты к виду, удобному для использования этого принципа.

Чтобы применить принцип соответствия (см., например, [20]), необходимо ввести переменные действия J . Они представляют собой интегралы $\oint \mathbf{p} d\mathbf{q}$, входящие в условия квантования Зоммерфельда. Энергия записывается как функция этих переменных. В классической механике показывается, что частоты ν_i , характеризующие сложное периодическое движение, определяются соотношениями

$$\nu_i = \frac{\partial E}{\partial J_i}. \quad (3.57)$$

Если имеется только одна частота и одна переменная действия, то

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\partial E}{\partial J}. \quad (3.58)$$

Исследуем теперь это соотношение в применении к рассмотренному ранее случаю.

Из формул (3.41) и (3.42) следует, что в случае орбит в магнитном поле мы имеем

$$J = \oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{r} = eB \times \text{Площадь орбиты в обычном пространстве} = \\ = \frac{\hbar^2}{eB} \times \text{Площадь орбиты в } \mathbf{k}\text{-пространстве.} \quad (3.59)$$

Согласно формуле (3.46), полученной для эллипсоидальных поверхностей энергии, та часть энергии, которая обусловлена квантованным движением, имеет вид

$$\text{Энергия} = j\hbar\omega = jh\nu = J\nu. \quad (3.60)$$

Другими словами, в этом случае так же, как и для линейного осциллятора, существует линейная связь между энергией и переменной действия J , так что производная $\partial E/\partial J$, входящая в (3.58), есть постоянная величина ν , не зависящая от энергии или от амплитуды колебаний. Иначе говоря, в этом предельном случае мы имеем фиксированную, не зависящую от энергии циклотронную частоту (для данной ориентации магнитного поля).

Однако это специальный случай. В общем случае энергия будет зависеть от J , или от площади орбиты в обычном или импульсном пространстве, нелинейно. Следовательно, в общем случае циклотронная частота определяется как

$$\begin{aligned}\omega = 2\pi\nu &= 2\pi \frac{\partial E}{\partial J} = \frac{2\pi}{B} \times \frac{\partial E}{\partial (\text{площадь в обычном пространстве})} = \\ &= \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \times \frac{\partial E}{\partial (\text{площадь в } k\text{-пространстве})} \quad (3.61)\end{aligned}$$

Другими словами, циклотронная частота будет зависеть от энергии, а измерение этой зависимости позволит непосредственным экспериментальным путем определить, как зависит от энергии площадь орбиты в обычном или импульсном пространстве в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

§ 8. Ограничения и возможности расширения метода циклотронного резонанса

Теперь, исследовав математические аспекты движения волновых пакетов в магнитном и периодическом полях, мы можем вернуться к рассмотрению циклотронного резонанса. Этот метод был с успехом использован для изучения ряда полупроводников — германия, антимонида индия и других. В таких полупроводниках носители заряда находятся на дне зоны проводимости и у потолка валентной зоны; в обоих случаях пригодна квадратичная аппроксимация для энергии, так что в первом приближении мы имеем циклотронные частоты, не зависящие от энергии. Используя образцы n - или p -типа, мы можем получать носители заряда преимущественно в зоне проводимости или в валентной зоне, так что эксперименты для каждой зоны можно вести независимо. Опыты такого типа, как было описано в § 1 этой главы, позволяют определить положения минимума зоны проводимости и максимума валентной зоны в зоне Бриллюэна, а использование формул для эффективной массы, приведенных в § 6, позволяет найти три величины m_x , m_y , m_z . Во всех случаях, исследованных к настоящему времени, две из этих

величин всегда оказывались одинаковыми, т. е. поверхность энергии представляла собой эллипсоид вращения.

Опыт связан с одной серьезной трудностью, обусловленной рассеянием волнового пакета, который описывает электроны, вращающиеся по циклотронной орбите. Это рассеяние может быть обусловлено тепловыми колебаниями, примесями и иными несовершенствами решетки. Как мы видели в предыдущих главах, оно составляет причину обычного электрического сопротивления. Очевидно, что резонанс нельзя экспериментально обнаружить, если мы не имеем возможности наблюдать по крайней мере целый период колебаний или, что лучше, несколько периодов. Если наблюдается только часть периода, то резонанс размажется настолько, что его невозможно будет обнаружить вовсе. Поэтому для успеха опытов по циклотронному резонансу необходимо, чтобы среднее время свободного пробега, рассмотренное в гл. 1, § 1, составляло не менее одного циклотронного периода. Обозначим это время через τ [что соответствует величине t_1 в формуле (1.7)]. Тогда для успешного наблюдения циклотронного резонанса необходимо, чтобы величина $\omega\tau$ была по крайней мере сравнима с единицей (а лучше — чтобы превышала ее).

При данной циклотронной частоте (т. е. при данном магнитном поле), чем ниже удельное сопротивление материала, тем больше время свободного пробега и тем лучше условия для успешного наблюдения циклотронного резонанса. В германии и антимониде индия носители заряда имеют высокую подвижность, поэтому наблюдать эффект в названных материалах весьма удобно. Разумеется, опыты проводятся при очень низких температурах, чтобы по возможности уменьшить тепловое рассеяние, и на очень чистых и совершенных образцах, чтобы свести к минимуму рассеяние на дефектах решетки. Если используются магнитные поля обычной величины, то даже при соблюдении всех этих предосторожностей среднее время свободного пробега сравнимо с циклотронным периодом. Для большинства других материалов, с меньшей подвижностью, опыт в этих условиях невозможен.

Очевидно, положение исправилось бы, если бы можно было увеличить циклотронную частоту, уменьшая период настолько, чтобы за время свободного пробега проходило несколько циклотронных периодов. Это требует увеличения магнитного поля, поскольку, как мы помним, $\omega = eB/m^*$. Поэтому в настоящее время экспериментаторы прикладывают много усилий, чтобы получить магнитные поля, превышающие те, которые были достижимы первоначально, чтобы можно было перевести циклотронную частоту из микроволнового диапазона, где она

находится для магнитных полей обычной величины, в инфракрасный диапазон. Некоторые опыты такого рода уже были выполнены, и можно надеяться, что в будущем при паличии неоперименты. Тогда можно будет использовать метод циклотронного резонанса в применении ко многим другим материалам.

Квантование Ландау делает возможной постановку опытов другого типа, оказавшихся чрезвычайно важными. Речь идет о так называемых магнитных межзонных переходах. Согласно формуле (3.47), в случае эллипсоидальной поверхности энергии можно найти уровни Ландау, введя правильную циклотронную частоту, определенную по соответствующим эффективным массам. Эти уровни подобны зеemanовским атомным уровням, для которых величина расщепления пропорциональна магнитному полю. В полупроводнике имеется один набор уровней Ландау для валентной зоны и другой — для зоны проводимости, с разными расстояниями между уровнями для каждой из зон, что обусловлено различием соответствующих эффективных масс. Оптические переходы с поглощением или испусканием света могут происходить с какого-либо из уровней Ландау валентной зоны на один из уровней Ландау зоны проводимости. Другими словами, можно ожидать, что в спектре поглощения будут обнаружены линии, частоты которых будут зависеть от магнитного поля, подобно эффекту Зеемана в атомных спектрах. Как описано в ряде статей, содержащихся в библиографии, ссылки на которые приведены в конце этой главы, такие явления действительно наблюдаются. Они подтверждают результаты опытов по циклотронному резонансу и во многих случаях дополняют их.

С явлением поглощения, обнаруженным для магнитных межзонных переходов, тесно связано явление преломления. Здесь, как и во всяком проявлении эффекта Зеемана, было найдено, что линии поглощения обусловлены колебаниями, поляризованными по кругу. Рассматривая соответствующий показатель преломления, мы обнаруживаем, что свет, поляризованный по кругу с одним направлением вращения, распространяется с одной скоростью, а с другим направлением вращения — с другой. В результате плоскополяризованный свет, который всегда можно разложить на две поляризованные по кругу компоненты с разными направлениями вращения, обладает плоскостью поляризации, которая непрерывно поворачивается по мере прохождения света через материал. В этом состоит одно из проявлений эффекта Фарадея, открытого свыше ста лет назад и послужившего первым экспериментальным указанием на связь между магнетизмом и светом. Это явление удовлетворительно объяс-

нено теорией Друде и составляет теперь один из полезных экспериментальных методов исследования уровней Ландау.

В опытах по исследованию магнитных межзонных переходов часто удается наблюдать значительное число уровней Ландау как в валентной зоне, так и в зоне проводимости. Оказалось, что эти уровни не находятся на равных расстояниях, чего следовало бы ожидать для эллипсоидальной поверхности энергии: расстояния между ними меняются с энергией. Это позволяет оценить величину отклонения реальной поверхности энергии от эллипсоидального вида, другими словами, вычислить более высокие члены в степенном разложении энергии как функции квазимульса, первые члены которого определяются формулой (3.43). Эти члены приводят к зависимости циклотронной частоты от энергии, что иногда трактуется как изменение эффективной массы по мере удаления от края зоны вглубь, где эффективная масса может быть определена как eV/ω .

В случае металлов ситуация совершенно отлична от той, которую мы наблюдаем в полупроводниках. Прежде всего, как нам известно из гл. 2, проводимость металла определяется поведением тех электронов, которые лежат близко к поверхности Ферми, так что совершенно ясно, что информация, получаемая из циклотронного резонанса и связанных с ним эффектов, касается поведения поверхности Ферми. Как правило, квадратичная аппроксимация для энергии как функции квазимульса здесь неприменима; в § 10 данной главы мы рассмотрим поверхность Ферми для реальных металлов. Таким образом, исследуя циклотронную частоту в этом случае, мы должны пользоваться методами, изложенными в § 7.

Вторая особенность, связанная с опытами по циклотронному резонансу в металлах, обусловлена наличием в них скин-слоя. Хорошо известный результат электромагнитной теории состоит в том, что электромагнитное поле высокой частоты не проникает в хороший проводник на большую глубину: его амплитуда падает в e раз на расстоянии, называемом глубиной скин-слоя δ и определяемом формулой ¹⁾

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\omega\sigma\mu_0}}. \quad (3.62)$$

Здесь σ — электропроводность вещества, μ_0 — константа, в системе МКС равная $4\pi \cdot 10^{-7}$ гн/м. Для частот циклотронного резонанса в хорошем проводнике глубина скин-слоя достаточно мала, так что поле проникает в металл на расстояние, малое по

¹⁾ См. формулу (5.17), а также работу [7] (гл. X, § 6). (См. также [18]. — Прим. ред.)

сравнению с диаметром циклотронной орбиты, который мы можем найти из формул § 5 этой главы. Очевидно, в таких условиях опыты по циклотронному резонансу невозможно осуществить так же, как в полупроводнике, где проводимость гораздо ниже и глубина скин-слоя гораздо больше. Чтобы обойти эту трудность, используют различные остроумные схемы¹⁾. Как правило, они основаны на том, чтобы дать возможность носителям заряда, большую часть времени находящимся под скин-слоем, один раз за период проникать в поверхностный слой, где на них именно в это время может действовать поле микроволновой частоты. С помощью многочисленных схем такого рода были получены чрезвычайно ценные результаты для ряда лучших металлических проводников. Однако для многих металлов более ценную и легче получаемую информацию дают опыты другого, хотя и сходного типа. Мы имеем в виду эффект де Гааза — ван Альфена, который будет рассматриваться в следующем параграфе.

Эффекты, обсуждавшиеся в этой главе, особенно циклотронный резонанс и тесно связанные с ним магнитные межзонные переходы и эффект Фарадея, в течение нескольких последних лет интенсивно исследовались экспериментально и теоретически. В опытах такого рода было получено много ценных сведений относительно ряда конкретных материалов. Читатель найдет статьи на эту тему в библиографическом списке, приведенном в конце главы.

§ 9. Эффект де Гааза — ван Альфена и связанные с ним опыты

Де Гаазом и ван Альфеном^[8] было открыто, что диамагнитная восприимчивость висмута обнаруживает осцилляторную зависимость от магнитного поля, причем если восприимчивость построена как функция $1/B$, то период осцилляций остается постоянным. С тех пор это явление наблюдалось и у многих других металлов²⁾. Объяснение, впервые данное Пайерлсом^[9], основано на представлении об уровнях Ландау. Будем исходить из соотношения (3.42), утверждающего, что площадь орбиты в k -пространстве должна составлять $2\pi j e B / \hbar$, где j — целое число. Рассмотрим компоненту квазиимпульса, параллельную магнитному полю. В зоне Бриллюэна она определяет плоскость, перпендикулярную полю, расстояние от которой до

¹⁾ См. дополнительную литературу к этому параграфу в конце главы, особенно статьи [1042, 1043, 1049, 1051, 2785, 2892].

²⁾ Ссылки на работы, касающиеся эффекта де Гааза — ван Альфена, можно найти в дополнительной литературе к § 9 в конце главы.

начала координат и представляет собой компоненту квазимпульса, параллельную полю. Орбита должна лежать в этой плоскости, представляя собой пересечение ее с поверхностью энергии. Форма орбиты может быть сложной, но площадь ее определяется выражением (3.42), так что разрешены только определенные энергии.

Если мы имеем дело с металлом, то поверхность Ферми будет пересекаться рассматриваемой плоскостью по кривой, соответствующей энергии Ферми. При этом мы получим дискретный ряд кривых, определяемых условием квантования Онзагера (3.42) и лежащих внутри поверхности Ферми. Следовательно, поверхность Ферми будет соответствовать некоторому значению j , которое обычно не бывает целым. Другими словами, под поверхностью Ферми мы имеем дискретный набор квантовых уровней энергии, причем максимальному целому значению j обычно соответствует энергия, расположенная слегка ниже фермиевской. Вследствие квантования уровней энергии полная энергия электронов в металле не будет той же, что и в отсутствие магнитного поля; мы должны складывать энергии квантованных орбит, а не интегрировать непрерывное распределение энергии вплоть до энергии Ферми.

При изменении магнитного поля положение уровней Ландау будет меняться. Следует ожидать, что полная энергия будет осциллировать с магнитным полем, приобретая примерно одно и то же значение каждый раз, когда уровень Ландау совпадает с энергией Ферми. Можно показать, что магнитный момент пропорционален производной от энергии¹⁾ по магнитному полю, так что магнитный момент, а следовательно, и магнитная восприимчивость также будут осциллировать с магнитным полем, проходя через один период, когда число уровней Ландау под поверхностью Ферми увеличивается на единицу. Заметим, что равенство (3.42) можно переписать в виде

$$\frac{1}{B} = j \frac{2\pi e/\hbar}{\text{Площадь орбиты в } k\text{-пространстве}}. \quad (3.63)$$

Мы ожидаем, что магнитная восприимчивость вернется к своему своему значению, когда число j увеличится на единицу. Это означает, что должна иметь место периодическая зависимость восприимчивости от $1/B$, причем период должен быть равен числу $2\pi e/\hbar$, деленному на площадь орбиты в k -пространстве. С этого и начинается объяснение эффекта де Гааза — ван Альфена.

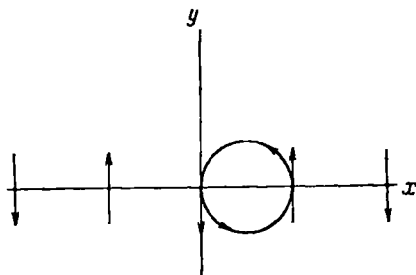
¹⁾ Строго говоря, следовало бы дифференцировать свободную энергию. В условиях полного вырождения, однако, рассуждения автора достаточны. — Прим. ред.

На самом деле, однако, ситуация несколько сложнее. В действительности мы одновременно имеем дело сразу со многими значениями компоненты квазимпульса, параллельной магнитному полю. Каждое из этих значений будет определять свою плоскость в зоне Бриллюэна и свое пересечение с поверхностью Ферми, чему будет соответствовать и свое значение площади орбиты в k -пространстве. Следовательно, чтобы получить суммарный эффект, надо сложить осциллирующие кривые со всеми различными периодами. Чистый результат мы получим только в том случае, если некоторые площади орбит в этой сумме статистически выделены. Такой случай действительно имеет место, в чем можно убедиться, рассматривая простейшую ситуацию, когда поверхности энергии представляют собой сферы. Разрежем сферическую поверхность энергии семейством равноудаленных параллельных плоскостей, соответствующих равным приращениям величины p_0 . Больше всего будет сечений, близких к максимальному сечению сферы, а не каких-либо других. Другими словами, экстремальное сечение в такой суперпозиции выделено. Такая же ситуация имеет место и в общем случае: в эффекте де Гааза — ван Альфена главную роль играют те осцилляции, которые соответствуют экстремальным площадям орбит в k -пространстве, максимальным или минимальным. Поскольку опыт можно выполнить для любого направления магнитного поля, очевидно, что таким образом мы можем составить карту экстремальных сечений поверхности Ферми плоскостями любой ориентации. Это и есть тот вид информации, который дает нам эффект де Гааза — ван Альфена.

Аналогичные сведения получаются из ряда других экспериментов. Отметим, в частности, исследование затухания ультразвука, предложенное Пиппардом [¹⁰]¹⁾. Пусть задана ориентация магнитного поля в металле, так что орбиты квантованы описанным выше образом в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Рассмотрим теперь орбиты не в импульсном, а в координатном пространстве. Из § 5 известно, что последние имеют ту же форму, что и в k -пространстве, но повернуты по отношению к ним на 90° ; мы знаем также, как найти размеры орбиты в пространстве координат. Пиппард рассматривает ситуацию, возникающую при прохождении через кристалл ультразвуковой волны в направлении, перпендикулярном магнитному полю, и с поперечной поляризацией, такой, что направление колебаний также

¹⁾ Был предложен и ряд других способов исследования зонной структуры по затуханию ультразвука. Некоторые из них не связаны с использованием магнитного поля. Ссылки на библиографию можно найти в конце главы.

перпендикулярно магнитному полю. Так, например, мы могли бы направить магнитное поле по оси z и рассматривать орбиту в плоскости xu , тогда звуковая волна должна распространяться вдоль оси x с направлением колебаний вдоль оси y . Известно, что в поперечной звуковой волне существует небольшое поперечное электрическое поле, связанное с поперечным смещением. Следовательно, в рассматриваемом случае будет существовать y -компонента электрического поля, величина которой синусоидально меняется с расстоянием x .



Ф и г. 3.2. Схема, иллюстрирующая поглощение ультразвука при циклотронном резонансе в поперечном магнитном поле.

Ультразвуковая волна распространяется вдоль оси x . Предполагается, что эта волна поперечная. Колебания, направленные вдоль оси y , создают поперечное электрическое поле, показанное стрелками, расположенными через каждые полволны. Магнитное поле, направленное вдоль z (перпендикулярно чертежу), приводит к круговым циклотронным орбитам, которые по предположению имеют размер, указанный на схеме. Таким образом, электрическое поле ускоряет электроны на обоих краях орбиты, вызывая резонанс.

Пусть теперь линейный размер электронной орбиты в пространстве в направлении x составляет половину длины волны ультразвука. Ультразвуковая частота столь мала, что за среднее время пребывания электрона на орбите напряженность электрического поля практически не изменяется. При обращении волнового пакета по орбите на одном ее краю он будет подталкиваться полем в одном направлении, а на другом краю орбиты — в противоположном (фиг. 3.2). Поскольку электрон вращается, оба эти толчка будут происходить в направлении вращения и ускорять электрон, отнимая энергию у ультразвуковых волн и приводя к их затуханию. Другими словами, затухание будет иметь место только в том случае, если длина волны ультразвука правильно подобрана. Основной эффект будет обусловлен электронами с поверхности Ферми, так как только они способны испытывать столкновения и, следовательно, поглощать энергию. Таким образом, мы получаем способ определения диаметра сечения поверхности Ферми. Здесь, как и в эффекте де Гааза —

ван Альфена, существует экстремальная орбита, которая будет давать максимальный вклад в наблюдаемый эффект.

Как поглощение ультразвука, так и эффект де Гааза — ван Альфена имеют (в случае металла) то преимущество перед циклотронным резонансом, что они обусловлены полями, легко проникающими в металл, — магнитным и ультразвуковым. С другой стороны, для циклотронного резонанса необходимо высокочастотное электромагнитное поле, проникающее лишь на глубину скин-слоя¹⁾. Для получения информации относительно вида поверхности Ферми был предложен и выполнен также ряд других опытов. (Обсуждение некоторых из них см. в [11].) К счастью, они дают результаты, находящиеся в общем согласии друг с другом и с расчетными данными для энергетических зон. Наиболее подробно такие сравнения были проведены для меди, и в следующем параграфе мы рассмотрим поверхность Ферми этого элемента в качестве примера того, чего можно ожидать для других материалов.

§ 10. Поверхность Ферми для меди

Опыты типа рассмотренных в предыдущем параграфе позволили определить вид поверхности Ферми для меди до того, как его смогла дать теория [12, 13]. В настоящее время имеются и расчеты, находящиеся в полном согласии с опытом (см. [21]). Оказывается, что в окрестности поверхности Ферми энергетические зоны почти такие же, как для свободных электронов. Если бы электроны были совсем свободны, то поверхность Ферми представляла бы собой сферу, содержащую по одному электрону на атом; соответственно ее объем был бы равен половине объема зоны Бриллюэна. Поскольку эта сфера полностью заключалась бы внутри зоны Бриллюэна, внутри нее оказались бы также и точки пересечения поверхности Ферми с направлениями [100], [111] и [110]. Фактически, однако, это не так: в направлении [111] (направление Λ) энергия Ферми лежит выше точки L'_2 и попадает внутрь большой щели между точками L'_2 и L_1 ; в случае свободных электронов этой щели вообще не было бы. Вследствие этого поверхность Ферми не является сферической, а выходит наружу в направлениях [111], разрезая гексагональные грани зоны Бриллюэна. Это показано на фиг. 3.3, где изображено пересечение поверхности Ферми с плоскостью, содержащей направления [110] и [111]. Видно, что поверхность

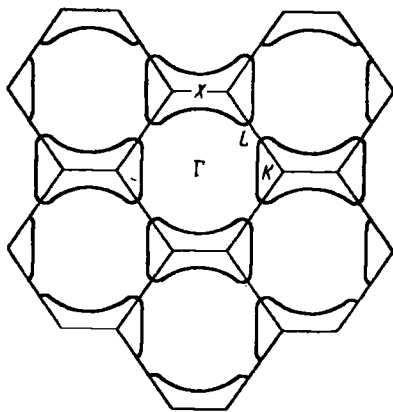
¹⁾ М. Я. Азбелем [19] была показана возможность аномально глубокого проникновения электромагнитного поля в металл в некоторых специальных случаях (см. также обзор [22]). — Прим. ред.

Ферми, в общем близкая к сферической, имеет «шейки», вытягивающиеся по направлению к каждой из этих гексагональных граней.

Принимая во внимание периодический характер обратного пространства, видим теперь, что поверхности Ферми в различных элементарных ячейках соединяются между собой посредством этих «шеек». В результате вместо отдельных поверхностей, замкнутых каждая в своей ячейке, имеется одна поверхность, простирающаяся по всему пространству. Это хорошо видно на фиг. 3.4, где построена модель поверхности Ферми, показанная в перспективе, сначала в одной зоне Бриллюэна, затем во всем пространстве. Подобная ситуация гораздо более типична для реальных металлов, чем изолированные замкнутые поверхности типа эллипсоидов.

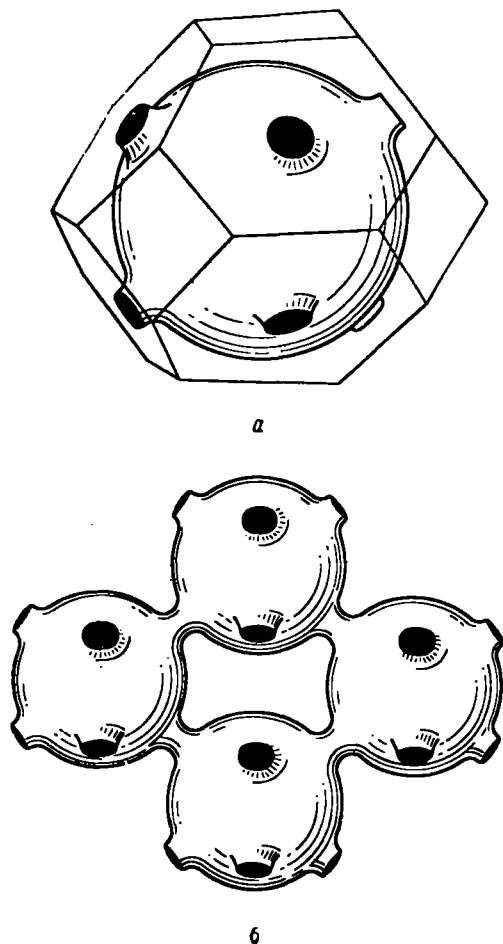
Все опыты с медью полностью и в деталях соответствуют этой картине, а количественные результаты хорошо согласуются с теорией. Таким образом, видно, что сечения орбит, получаемые из циклотронного резонанса или из эффекта де Гааза — ван Альфена, сильно отличаются от тех, которые можно было бы ожидать на первый взгляд. Так, если магнитное поле перпендикулярно орбите, показанной на фиг. 3.3, то это значит, что наблюдается циклотронная частота для электронов, вращающихся вокруг незаполненного пространства. Если же магнитное поле перпендикулярно гексагональной плоскости, то можно наблюдать электроны, вращающиеся вокруг малого сечения одного из «шеек». Таким способом и используя также другие ориентации магнитного поля, получают набор резонансных частот или набор площадей поперечных сечений, которые можно сопоставить с различными особенностями поверхности Ферми.

Пусть теперь магнитное поле ориентировано в некотором произвольном направлении, а не в направлении симметрии. Тогда возможны незамкнутые орбиты, которые простираются в обратном (а потому и в обычном) пространстве бесконечно



Фиг. 3.3. Пересечение поверхности Ферми меди с плоскостью, содержащей направления $[100]$, $[110]$ и $[111]$ (из центра зоны Бриллюэна Γ к точкам X , K и L соответственно). (По расчетным данным [17, 15])

далеко (хотя фактически движение по ним быстро обрывается вследствие столкновений). На фиг. 3.5 показан пример такой

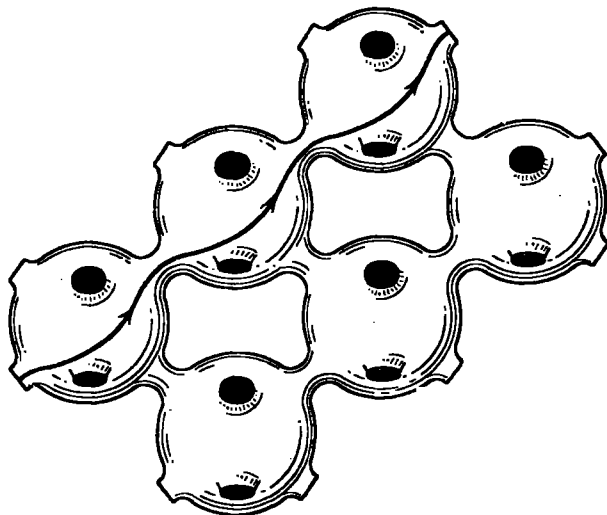


Фиг. 3.4. Вид поверхности Ферми меди в одной зоне Бриллюэна (а) и в нескольких соседних ячейках (б).

Отметим сходство схемы б с сечением, показанным на фиг. 3.3. Точка L на фиг. 3.3 соответствует центру гексагональной грани на фиг. 3.4, а.

открытой, или незамкнутой, орбиты. Ясно, что, разрезая эти поверхности Ферми плоскостями, перпендикулярными магнитному полю и отвечающими различным значениям ρ_0 , можно получить чрезвычайно разнообразные и причудливые формы орбит,

В теории магнетосопротивления (т. е. в теории, рассматривающей влияние магнитного поля на сопротивление) показывается, что существует глубокая разница между случаями открытых и замкнутых орбит, т. е. наблюдаемый результат существенно зависит от направления магнитного поля. Асимптотический ход сопротивления в пределе больших магнитных полей совершенно различен для этих двух случаев. Это позволяет поставить



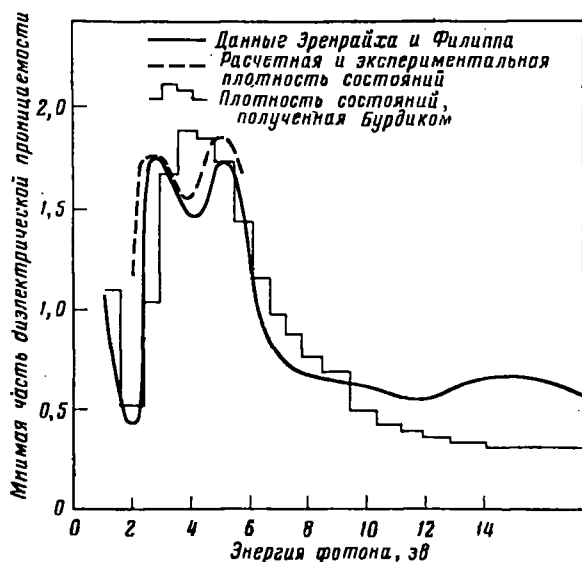
Фиг. 3.5. Открытая орбита в меди, лежащая на поверхности Ферми, изображенной на фиг. 3.4.

Существенно, что такие открытые орбиты переходят из одной ячейки в другую по «шейкам», соединяющим части поверхности Ферми, заключенные в различных ячейках.

опыты по измерению магнетосопротивления, подобрав направления магнитного поля и тока так, чтобы составить диаграмму направлений в решетке, для которых возможны или невозможны открытые орбиты. При этом были получены поразительные результаты в смысле резкого изменения в поведении при очень малых вариациях угла. В отношении сопоставления этих результатов с теоретическими расчетами формы зон наши успехи еще очень незначительны. Тем не менее ясно, что такие опыты проливают немалый свет на структуру энергетических зон.

Было выполнено много экспериментальных работ по измерению магнетосопротивления, давших большое количество полезных сведений относительно свойств энергетических зон. Ссылки на соответствующие работы можно найти в конце этой главы.

Описанные нами типы экспериментов, использующие эффект де Гааза—ван Альфена, циклотронный резонанс и магнетосопротивление, ни в коей мере не являются единственно возможными при исследовании таких материалов, как медь. Спайсер и сотр. [14] выполнили опыты совсем другого типа, использующие внешний фотоэффект. Названные авторы освещали

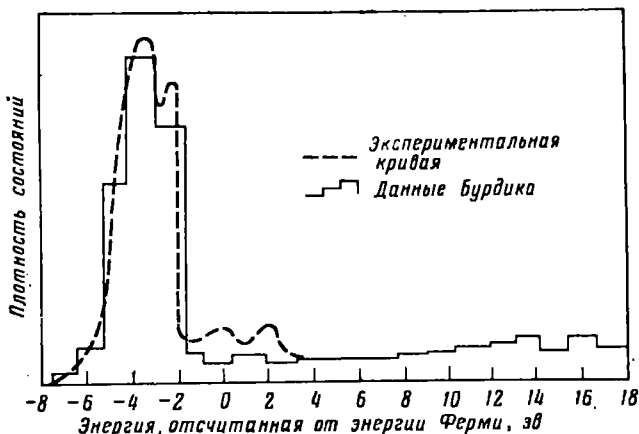


Фиг. 3.6. Оценка плотности состояний для меди (по Берглунду и Спайсеру [14]).

Пунктирная кривая обозначает плотность состояний, определенную экспериментально по внешнему фотоэффекту. Сплошная кривая рассчитана Бурдиком [18].

металл монохроматическим светом, кванты которого $h\nu$ были достаточно велики, чтобы поднять электроны из зоны проводимости до энергии, достаточно высокой для выхода электронов из кристалла. Затем наблюдалось распределение фотоэлектронов по скоростям. В случае меди были обнаружены не только электроны, вырванные из зоны проводимости (4s), но также и те, которые были вырваны из 3d-зоны. Довольно сложной задачей оказался здесь учет влияния таких эффектов, как упругое и неупругое рассеяние электронов при их выходе из металла или различное значение вероятности поглощения фотона для различных электронов. Однако, проделав все это авторы смогли экспериментально определить вид кривой плотности состояний для энергетических зон. Этот результат был

сопоставлен с кривой, вычисленной Бурдиком [15] по методу присоединенных плоских волн (фиг. 3.6). Бурдик просто подсчитал число состояний для последовательности конечных интервалов энергии, в результате чего его кривая имеет ступенчатый вид. Очевидно, что экспериментальные значения хорошо совпадают с расчетными и обнаруживают детали, которых Бурдик не смог получить в своем расчете вследствие использования слишком больших энергетических интервалов. Таким



Фиг. 3.7. Частотная зависимость мнимой части диэлектрической проницаемости (по Берглунду и Спайсеру [14]). Оптические данные Эренрайха и Филиппа взяты из [16], расчетные данные Бурдика приведены на фиг. 3.3.

образом, видно, что d -зоны можно исследовать экспериментально так же, как и зону проводимости.

Можно указать опыты еще одного типа, также дающие информацию относительно d -зон. Свет, падающий на кристалл, может переводить электроны из этих зон в зону проводимости. В случае внешнего фотоэффекта энергия падающего света должна быть достаточна для удаления электронов из металла. В случае меньших энергий $h\nu$ электроны тем не менее могут быть заброшены в более высокие незаполненные зоны, лежащие выше уровня Ферми, но ниже энергии, необходимой для эмиссии. Как мы увидим в гл. 5, такое поглощение сказывается на оптических свойствах кристалла, обнаруживаясь непосредственно в появлении мнимой части у диэлектрической проницаемости. Оптические характеристики меди измерялись много раз; наиболее современные данные получены Эренрайхом и Филиппом [16]. На фиг. 3.7 показана частотная зависимость

мнимой части диэлектрической проницаемости, определенная экспериментально Эренрайхом и Филиппом и вычисленная Берглундом и Спайсером по кривой плотности состояний (с использованием ряда упрощающих предположений, которые считались оправданными). Расчет проводился как с помощью экспериментально полученной кривой плотности состояний, так и на основе теоретических результатов Бурдика. Очевидно, что согласие между экспериментом и результатами каждого из этих расчетов действительно очень хорошее, хотя и существуют разногласия между различными авторами относительно правильности их интерпретации. Иначе говоря, удается проверить многие результаты, касающиеся деталей строения вычисленных энергетических зон как вблизи поверхности Ферми, так и в более глубоко лежащих зонах.

По-видимому, медь исследована более полно, чем любое другое вещество, в том смысле, что выполнены опыты многих типов и существуют точные расчеты, с которыми их можно сравнивать. Однако со временем мы находим все больше и больше случаев, для которых имеются как надежные расчеты, так и большое количество различных типов экспериментов для сравнения. В настоящее время можно сказать, что существует поразительно хорошее согласие между рассчитанной структурой энергетических зон и результатами различных типов экспериментов, относящихся к электропроводности и к оптическим свойствам. По-видимому, по мере роста числа работ, выполненных для отдельных материалов, мы находим чрезвычайно благодатную почву для приложения совместных усилий экспериментаторов и теоретиков с целью объяснения весьма запутанных свойств энергетических зон металлов и полупроводников.

§ 11. Библиография по электронным свойствам конкретных материалов

В предыдущих главах было дано чрезвычайно краткое и описательное рассмотрение электрических и магнитных свойств полупроводников и металлов. Таким же описательным образом будут изложены в последующих главах и другие проблемы. В этом томе мы не будем рассматривать все эти вопросы подробно. Электрические свойства и явления переноса в металлах и полупроводниках как в отсутствие, так и при наличии магнитного поля представляют собой в настоящее время объект чрезвычайно интенсивных исследований, и литература по этим вопросам весьма обширна. В библиографии в конце этого тома приводится большое количество ссылок на статьи, касающиеся

этих вопросов, но даже этот длинный список далеко не полон. В конце глав этой книги мы даем списки статей, относящихся к тем или иным конкретным проблемам. Так, в гл. 2 к § 4 приведен список статей, касающихся эффекта Холла и связанных с ним гальваномагнитных эффектов; в гл. 3 к § 8 — список статей, касающихся циклотронного резонанса, магнитных межзонных переходов и эффекта Фарадея; к § 9 — список статей, относящихся к эффекту де Гааза — ван Альфена и к связи ультразвуковых измерений с определением структуры зон; к § 10 — список статей, относящихся к магнетосопротивлению. В ссылках к гл. 5, § 5 перечислены работы, посвященные оптическим свойствам различных веществ; к гл. 8, § 6 — колебаниям решетки, к гл. 10, § 4 — энергии сцепления. Наконец, в ссылках к гл. 11, § 7 указаны статьи по вопросам, в которых главная роль играет многоэлектронный подход (к числу их относятся, в частности, плазменные колебания).

Эти особые списки, конечно, не исчерпывают всех статей, помещенных в библиографии. По большей части они относятся к тому или иному аспекту проблемы электропроводности и теплопроводности или других разделов теории явлений переноса, а также к применению тех или иных методов для интерпретации свойств конкретных материалов. Во многих случаях работы, в которых использованы различные экспериментальные методы, имеют дело с одним и тем же типом материала. В этой связи читатель должен помнить, что априорные расчеты энергетических зон для различных материалов рассматриваются в т. 2 этой серии (см. [21]), а библиография, касающаяся расчетов энергетических зон, которая там приводится, в данном томе не дублируется.

В наш список включены сначала работы, посвященные полупроводникам и диэлектрикам, а затем — металлам. Он содержит исследования энергетических зон, эффективных масс, поверхностей Ферми и, т. д. с помощью опытов различного типа — как рассматривавшихся в гл. 2, 3, так и оптических и многих других. Все статьи разделены по общим категориям материалов, а не выписаны отдельно для каждого конкретного вещества.

ЛИТЕРАТУРА

1. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Phys. Rev., 98, 368 (1955).
2. Ландау Л. Д., Zs. Phys., 64, 629 (1930).
3. Фок В., Zs. Phys., 47, 446 (1928).
4. Dingle R. B., Proc. Roy. Soc., A211, 500 (1952).
5. Onsager L., Phil. Mag., 43, 1006 (1952).
6. Shockley W., Phys. Rev., 90, 491 (1953).
7. Slater J. C., Frank N. H., Electromagnetism, New York, 1947.

8. De Haas W. J., van Alphen P. M., *Communs. Phys. Lab. Univ. Leiden*, 212a (1930); 220d (1932).
9. Peierls R., *Zs. Phys.*, 80, 763 (1933).
10. Pippard A. B., *Phil. Mag.*, 2, 1147 (1957).
11. W. A. Harrison, M. B. Webb (eds.), *The Fermi Surface*, New York, 1960.
12. Pippard A. B., *Phil. Trans. Roy. Soc.*, A250, 325 (1957).
13. Shoenberg D., *Phil. Trans. Roy. Soc.*, A255, 85 (1962).
14. Berglund C. N., Spicer W. E., *Phys. Rev.*, 136, A1030, A1044 (1964).
15. Burdick G. A., *Phys. Rev.*, 129, 138 (1963).
16. Ehrenreich H., Philipp H. R., *Phys. Rev.*, 128, 1622 (1962).
17. Segall, *Phys. Rev.*, 125, 109 (1962).
- 18*. Тамм И. Е., *Основы теории электричества*, 3-е изд., М., 1946.
- 19*. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, 39, 400 (1960).
- 20*. Слэтер Дж., *Квантовая теория атомной структуры*, т. 1, изд-во «Мир», 1965.
- 21*. Slater J. C., *Symmetry and Energy Bands in Crystals*, vol. 2, New York, 1965.
- 22*. Канер Э. А., Гантмахер В. Ф., *УФН*, 94, 193 (1968).

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

к § 8

Циклотронный резонанс, магнитные межзонные переходы, эффект Фарадея: [929]; [1025] (AgBr); [1035] (Bi); [1036] (Pb); [1037] (Bi); [1042, 1043, 1049, 1051]; [1055] (Bi); [1074] (CdS); [1075—1079] (Ge, Si); [1080] (InSb); [1103, 1104, 1171, 1183]; [1215] (Sn); [1216] (Pb); [1217] (In); [1329] (InSb); [1335] (InSb); [1336]; [1338] (Bi); [1411—1413] (Bi); [1459, 1460] (InSb); [1462—1464]; [1479] (Te); [1526] (In); [1532]; [1703—1705] (Sb); [1706] (KCl); [1786] (Ge); [1789] (Bi); [1790] (Si, Ge); [1791] (CdS); [1809]; [1838, 1839] (Ge); [1840, 1851—1853]; [1860] (Ge); [1862, 1863] (Si, Ge); [1866] (сплавы Ge—Si); [1870]; [1888] (Ge); [1911] (Bi); [1967] (Bi); [1989] (Bi); [1992]; [2017] (Sn, Cu); [2018, 2019] (Al); [2024] (W); [2051, 2073, 2163]; [2193] (Al); [2197] (Bi); [2198] (графит); [2199, 2200] (Zn, Bi); [2201] (Zn); [2202] (Cd); [2243, 2299]; [2339] (Ge); [2374, 2375] (Al, Na, K); [2423] (Ge); [2430, 2457]; [2460] (Ge); [2499] (Si); [2523] (Bi); [2534]; [2542—2544] (Ge); [2545] (Si); [2645]; [2655] (графит); [2718, 2719]; [2748] (Ge, Si); [2777] (CdTe); [2785—2787, 2789, 2790]; [2799] (Bi); [2800] (Bi—Sb); [2831, 2832] (Ge); [2846]; [2861] (Bi, InSb, InAs); [2872, 2873] (Sn); [2875] (Pb, Bi); [2892] (Sn); [2893—2895] (Cu); [2906, 2907, 2912]; [2980] (Sn); [2981] (Cu); [3002, 3039, 571, 590]; [3172, 3173] (Al, Cu); [3174] (Au); [3193] (Bi); [3194] (графит); [3200] (Bi); [3201] (InSb); [3205—3207, 3209, 3230]; [3271, 3272] (Ge); [3300, 3301, 3362]; [3377] (Ge); [3378, 3535]; [3561, 3562] (Ge); [3579]; [3587] (Ge); [3600]; [3619] (Al); [3653] (GaAs); [3654] (InP); [3656] (InSb); [3658] (AlSb, GaP); [3732, 3733] (PbTe); [3737]; [3752] (графит); [3760] (PbTe); [3767—3769]; [3777] (Ge); [3798, 3799] (Ge); [3708—3712] (InSb, InAs, InP, GaAs); [3813] (InAs); [3891, 3894, 3916, 3917]; [3921] (GaSb); [3963, 3975, 4030, 4044]; [4050] (Ge); [4052] (Si); [4053, 4054] (алмаз); [4105] (Ga); [4129]; [4141] (Ge, Si); [4143, 750, 4160, 4164]; [4207] (Ge); [4219, 4220] (CdS); [4260]; [4268] (InAs, InSb); [4293]; [4377] (Bi); [4381] (InSb); [4444] (Al); [4463] (Sb); [4471]; [4490] (CdAs); [4491] (II—V); [4504, 4505] (PbTe); [4512]; [4544] (Ge); [4556, 4557]; [4645] (Bi); [4662]; [4703] (Si); [4784] (InSb); [4794] (W); [4796] (соли Pb); [4838, 4872]; [4909] (Pb); [4916, 4917, 4925—4927]; [4969] (InAs, InSb); [4970—4974] (Ge, GaSb); [4975, 4976] (Si); [4977, 4978] (InSb).

к § 9

Эффект де Гааза — ван Альфена: [961] (Sn); [988] (Fe); [1005]; [1195, 1196] (Cd, Zn); [1198] (As); [1337] (Bi); [1348] (Cr); [1349] (In); [1351, 1352, 1355] (Bi); [1600] (Bi); [1626] (Ca); [300, 1783, 1800]; [2170] (Zn); [2194] (Al); [2249] (Zn); [2346] (Mg); [2378] (Cd); [2400] (Al); [2525] (Zn—Mn); [2526] (сплав Zn); [2532]; [2561] (Zn); [2651]; [2727] (Zn); [2728] (Ni); [2729, 2730] (Re, Cu); [2731] (Ag); [2858] (Sb); [2909] (Fe); [3002, 3046—3048, 3383, 3477]; [3774] (Rb); [3790]; [3803] (Bi); [734, 3952]; [4011] (Al); [4077] (Zn); [4078] (Ga); [4177] (InBi); [4178—4180] (Sb, Bi); [769, 770] (Bi); [4298] (Al, Sb); [4299—4302] (Cu); [4303, 4304] (Cu, Ag, Au); [4305, 4306] (Ag, Au); [4416] (графит); [4446] (графит); [4502, 4503] (PbTe, PbS); [4629] (Bi₂Te₃); [4633—4635] (K, Re, Nb, Ta, InBi); [4636] (Zr); [4910] (Bi—Te); [4840, 4942, 4945].

Ультразвук: [140, 940, 942]; [1252] (Ge, Si); [1262]; [1544] (MgO, Al₂O₃); [1723] (Cd, Zn); [1910]; [1979] (Sb); [2191, 2192] (Sn); [2234] (Cd); [2250] (Zn, Cd); [2417, 2419, 2456, 2486, 2487, 2577, 2639]; [2709] (Al); [2766] (Al); [2791—2793]; [2858] (Sb); [2913, 3030, 3056, 592, 3175]; [3319] (благородные металлы); [3343, 3359, 3419, 3420]; [3422—3424] (Ti, Pb); [3512—3516]; [3541] (Bi); [3566, 3581, 3639—3645, 3685], [3784—3788] (Sn); [3795—3797, 3945, 3947, 3948, 4025, 4029]; [4064, 4065] (In, W); [4066, 4067] (Ti); [4068] (W); [4084, 4085] (Bi); [4104] (Al); [4128, 4322, 4426, 4429, 4431, 4468]; [4811] (Ge); [4861].

к § 10

Магнетосопротивление: [921] (Ge); [949] (Au); [950, 956] (Cd, Zn, Ti); [959] (Bi); [960] (Zn); [961] (Sn); [966, 967] (PbTe); [1012, 1014, 1016, 1061]; [1091] (Al); [1126]; [1178] (InAs); [1197] (графит); [1199] (Cu); [1205] (Ge); [1265]; [1389] (InSb); [1395, 1475]; [258] (Bi); [1534, 1535]; [1543] (InAs); [1544] (InSb); [1608]; [1617] (благородные металлы); [1674] (PbTe); [1743] (Cu); [1896, 1922]; [1984] (Bi); [1987] (Ge); [1998] (Ge); [2022, 2023]; [2025—2027] (Ni, Mo, W); [2029] (Mo, W); [2055] (InSb); [390]; [2178] (Cu); [2180] (Ge); [2210] (щелочные металлы); [2249] (Zn); [2284] (Ge); [2285] (InP, GaAs); [2296, 2301] (Ge, Si); [2305, 2306] (Ge); [2416, 2421, 2450]; [2527] (Mg, Al+Mn, Fe); [2565] (Sn); [2582] (Bi); [2672] (PbS); [544, 2756]; [2768] (PbTe); [554]; [2851] (алмаз); [2864, 2865] (Ge, Si); [2914] (Cu); [2915, 2916]; [2958] (полупроводники типа Ge); [3124] (PbTe); [3287, 3292, 3295, 3296]; [3328] (Si); [3370] (Al); [3371—3373]; [3399] (щелочные металлы); [3402]; [3427] (InSb); [3479] (Ni); [3488] (Ni); [3536] (GaSb); [3540] (Ge, Si); [3577]; [3782] (Cu); [3788] (Cu); [3846] (Si); [730, 731]; [4010] (Cu, Ag, Au); [4079] (Fe); [4094]; [4169] (Ge); [763, 4254, 4292, 4293]; [4308] (PbTe); [4348] (InAs); [4350] (InSb); [793, 4402, 4403]; [4415] (графит); [4451, 4452]; [4453] (Mg); [4507]; [4646] (AgBr); [4671]; [4675] (Bi); [4755] (Bi); [4809] (Ge); [4829] (HgSe); [4878] (PbTe); [4907] (Cu—Mn); [4923] (Cd).

к § 11

Алмаз, кремний, германий, соединения A^{III}B^V и A^{IV}B^{VI}: [899] (Ge); [902] (In—GaAs); [921] (Ge); [924] (InSb); [929, 930] (InSb); [963] (Ge); [981, 982] (InSb, InAs); [1023] (Ge); [1078] (Ge, Si); [1080] (InSb); [1105, 1106] (Ge); [1108] (GaAs); [1113, 1114] (Ge, Si); [1120] (Ge); [1140] (InSb); [1161] (GaSb); [1173] (Ge, Si); [1178] (InAs); [1179] (Ge); [1184] (Ge); [1204, 1205] (Ge); [1227] (InSb); [1234, 1235] (ZnS, алмаз); [1249] (GaAs); [1252] (Ge, Si); [1262] (InSb); [1294] (алмаз); [1327] (Ge); [1329] (InSb); [1335] (InSb); [1360] (Ge—Si); [1361] (GaAs); [1384] (Ge, Si); [1388, 1389] (InSb); [1390] (алмаз); [1410] (Ge); [1427] (Ge, Si); [1450, 1451] (Ge); [1457] (InSb); [1458] (Si); [1459—1461] (Si, InSb); [1495—1497] (Ge, Si); [1498, 1499] (GaAs, GaSb); [1500,

1501] (InAs, GaAs, InP); [1504]; [1510] (алмаз); [1515] (Ge, Si); [1528] (Si); [1543] (InAs); [1544] (InSb); [1560] (Ge); [1568, 1569] (алмаз); [1571] (алмаз); [1631, 1632, 1634] (Ge, Si); [1664] (Ge); [1672] (Si, Ge); [1679] (ZnS); [1695] (InSb); [1702] (Ge, Si); [1725] (Ge); [1786—1788, 1790] (Ge, Si); [1791] (CdS); [1812] (InAs); [1827, 1838] (Ge); [1860—1862] (Ge, Si); [1863] (InSb); [1866] (Ge—Si); [1883] (Ge); [1885] (InSb); [1888] (Ge); [1925, 1926] (Ge); [1927, 1929] (InSb); [1931] (InAs—P); [1932, 1933] (GaAs); [1934] (III—V); [1936] (IV; III—V; II—VI); [1953] (ZnS); [1987] (Ge); [1991] (Ge, Si); [1998] (Ge); [2007] (Ge, Si); [2009, 2011] (Ge); [2055] (InSb); [2068] (Ge); [2099] (InSb); [2105—2108] (InSb); [2109] (InAs); [2134, 2135] (Ge); [2180, 2181] (Ge); [2204] (InC6); [2236, 2237] (Ge); [2251] (Ge); [2283] (Ge—Si); [2284] (Ge); [2285] (InP, GaAs); [2296, 2299—2301] (Ge, Si); [2304] (Ge); [2305, 2306] (Ge); [2314] (Ge); [2339] (Ge); [2348] (Ge); [2351] (Si); [2381, 2382] (CdS); [2383] (GaP); [2399] (Si); [2423] (Ge); [2443] (Ge); [2449] (Si); [2459] (GaAs); [2460] (Ge); [2462] (Ge, Si); [2484, 2485] (Ge); [2499] (Si); [2503] (InSb); [2518] (Si); [2543] (Si); [2544] (Ge); [2545] (Si); [2554] (Ge); [2564] (InSb); [2568] (Ge); [2599] (InSb); [2604] (InSb); [2606] (Si+O); [2627] (Si); [2632] (Ge); [2643, 2644] (ZnO); [2748] (Ge, Si); [2755] (Ge, Si); [2765] (Ge, Si); [2767] (Ge); [2831] (Ge); [2836] (CdS); [2851] (алмаз); [2861] (InSb, InAs); [2865] (Ge, Si); [2891] (Ge); [2904] (Ge, Si); [2925] (Si); [2926] (Ge); [2930—2932] (Si); [2947] (алмаз); [2955, 2958] (Ge, Si); [2983, 2985, 2986] (Ge); [2993] (Si, Ge); [3021] (Si); [3026] (InSb); [3060] (Ge); [3068] (Ge); [3134] (InSb); [3179] (ZnS—Se—Te); [3192] (Ge, Si); [3198] (Ge); [3204] (In, Sb, III—V); [3217] (Si); [3220] (типа алмаза); [3271, 3272] (Ge); [3318] (Si); [3327, 3328] (Si); [3330] (Si); [3377] (Ge); [3391] (Ge); [3407—3412] (Ge, Si); [3426, 3427] (InSb); [3458] (структуры алмаза и цинковой обманки); [3478] (GaAs); [3501, 3502] (кристаллы типа алмаза); [3536] (GaSb); [3540] (Ge, Si); [3549] (AlAs, AlSb); [3561, 3562] (Ge); [3570, 3571] (Ge); [3572] (Ge); [3587] (Ge); [3589] (алмаз); [3602] (Si); [3631] (Si, Ge); [3651] (InSb); [3653, 3654, 3656] (GaAs, InP); [3657] (InSb, GaAs); [3658] (AlSb, GaP); [3687] (Ge, Si); [3705] (GaP); [3707] (Ge); [3724] (Ge); [3762] (Ge); [3777] (Ge); [3798] (Ge); [3808—3812] (InSb, InAs, InP, GaAs); [3813] (InAs); [3837—3839] (Ge, Si, Ge—Si); [3840] (интерметаллические соединения); [3846] (Si); [3851] (структура цинковой обманки); [3882] (III—V); [3886] (алмаз); [3892] (Ge); [3904] (Si); [3911, 3913—3915] (Ge, Si); [3921] (GaSb); [4008] (Ge); [4047] (InSb); [4050] (Ge); [4052] (Si); [4053, 4054] (алмаз); [4115] (InSb, GaSb); [4126] (InSb); [4132] (Ge); [4137] (Si); [4141] (Ge, Si); [4161, 4162] (Ge, Si); [4169] (типа Ge); [4177] (InBi); [4203] (Ge); [4205] (Ge); [4207] (Ge); [4219, 4220] (CdS); [4224] (Si, Ge); [4234] (Ge, Si); [4267, 4268] (InAs, InSb); [4271] (Si); [4277] (типа алмаза); [4296] (Ge); [4348, 4350, 4351] (InAs, InSb, Ge); [4369] (Ge, Si); [4373] (Ge); [4381] (InSb); [4433] (Si); [4439] (InSb); [4441] (Si); [4481] (InAs); [4496] (Ge, Si); [4521] (Ge); [4526] (InSb); [4532] (Si); [4544] (Ge); [4547] (Ge); [4588] (Si); [4597] (Ge, Si); [4603, 4604] (Ge, Si); [4608] (Ge); [4635] (InBi); [4655] (типа ZnS); [4656] (типа алмаза); [4703] (Si); [4731] (Ge, Si); [4732] (Si); [4778] (алмаз); [4784] (InSb); [4788] (Ge); [4799] (III—V); [4800] (Ge); [4809] (Ge); [4811] (Ge); [4812] (Ge+As); [4881, 4882] (алмаз); [4883] (Ge); [4891] (Si); [4895] (Ge); [4905] (InSb); [4918] (GaP); [4921] (Ge); [4929] (Ge); [4964] (InAs); [4969] (InAs, InSb); [4970, 4972, 4974] (Ge); [4975] (GaSb); [4976] (Si); [4977, 4978] (InSb).

Другие полупроводники и диэлектрики: [904] (S); [947] (Te); [967—969] (PbTe, PbS, PbSe); [1001] (KI); [1002] (RbI); [1003] (BaO); [1025] (AgBr); [1074] (CdS); [1088] (I, Se); [1130] (щелочногалогидные соединения); [1138] (AgCl, AgBr); [1160] (TiO₂); [1186] (MgO); [1187] (щелочногалогидные соединения); [1221] (LiH); [1229] (PbTe, PbSe); [1270] (HgTe, HgCdTe); [1275] (TiO₂); [1277] (TiO₂); [1295] (TiO₂); [1357] (I); [1391] (органические

полупроводники); [1407, 1408] (галогениды серебра); [1428] (ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe); [1429] (ZnTe); [1430] (ZnSe); [1482] (LiH); [1488] (Te); [1489] (Te); [1505] (IV—VI, V); [1548] (Se, Te); [1558] (SiC); [1564] (MgO, Al₂O₃); [1625] (ScO); [1627] (PbTe); [1647] (неорганические полупроводники); [1674, 1675] (PbTe); [1684] (Ce_{3-x}S₄); [1685] (CsS); [1699] (LiF); [1706] (KCl); [1768] (PbTe); [1777] (щелочногаллоидные соединения); [1791] (CdS); [1798] (PbS, PbSe, PbTe); [1857, 1858] (Bi₂Te₃); [1874—1876] (соединения переходных металлов типа CuAl₂, FeS₂); [1964] (антимонид платины); [1981] (TiC, TiN, TiO); [2035] (PbTe); [2044] (III—VI); [2048] (типа Те); [2056] (Te); [2057] (CdTe, CdSe); [2061] (NaCl); [2076] (ZnS); [2110] (SrTiO₃); [2124] (CdSb); [2168] (Te); [2182] (Bi₂Te_{3-y}Se_y); [2218] (CdTe); [2245] (PbTe); [2287] (Se); [2288] (щелочногаллоидные соединения); [2310, 2311] (Bi₂Te₃); [2341] (Cu₂O); [2473] (Cd_xHg_{1-x}Te); [487] (щелочногаллоидные соединения); [2583] (Kl); [2600] (KCl); [2629, 2630] (PbSe); [513] (Hg₂Cl₂); [514] (рутил, анатаз); [515] (кварц); [2658] (щелочногаллоидные соединения); [2672] (PbS); [2673] (CdS); [2689] (PbS); [2722] (феррит Co); [2723] (окислы переходных металлов); [2741] (дибориды переходных металлов); [2754] (KCl); [2758] (SrTiO₃); [2768] (PbTe); [2777] (CdTe); [2806] (типа Th₃P₄); [2811] (Sb₂S₃); [2825] (нафталин, антрацен); [2830] (KCl); [2852] (MgO); [2879] (CdSb, ZnSb); [2887] (CdS); [2970] (KCl+Ti); [2972] (щелочногаллоидные соединения); [2973] (галогениды цезия); [3007] (LiF); [3016] (ZnSb); [3022] (Bi₂Te₃); [3028] (щелочногаллоидные соединения); [3034, 3036] (Te); [3040] (щелочногаллоидные соединения); [3045] (Te); [3058] (PbTe); [3118] (NaCl); [3122, 3123] (Bi₂Te₃); [3124] (PbTe); [3231] (антрацен); [3239] (Bi₂Te₃); [3268] (LiF); [3312] (Cu₂O); [3334] (CdTe); [3363] (PbS); [3385] (бориды, карбиды и нитриды переходных элементов); [3460] (щелочногаллоидные соединения+Ag); [3483] (NaCl); [3553] (галогениды серебра); [3569] (LiCl, LiF); [3601] (NaCl); [3603] (рутил); [3635] (Mg₂Si); [3649, 3650] (PbS, PbSe, PbTe); [3655] (CdTe); [3681] (щелочногаллоидные соединения); [3703] (ZnS); [3710] (MgO); [3725] (NiO); [3731] (галогениды калия); [3732, 3733] (PbTe); [3760] (PbTe); [3773] (IV—VI); [3791] (CdS); [3814] (PbS); [3820] (Te); [3833] (SiC); [3851] (структура цинковой обманки); [3855] (TiN); [3873] (Se); [3884] (щелочногаллоидные соединения); [3897] (щелочногаллоидные соединения); [3918] (структура теллура); [3919] (PbS, PbTe); [3937] (ZnS); [3997] (LiH); [4018] (Se); [4051] (щелочногаллоидные соединения); [4070] (PbS); [4073] (PbTe); [4074] (Mg₂Ge); [4095] (Te); [4117] (силициды переходных металлов); [4127] (HgTe, HgSe); [4157] (Te); [4199] (окислы 3d-металлов); [4200] (TiO); [4222] (PbS); [4223] (PbS, PbSe, PbTe); [4240] (KCl); [764] (щелочногаллоидные соединения); [4255—4257] (щелочногаллоидные соединения); [4290] (HgTe—CdTe); [4308] (PbTe); [4310] (Sb₂S₃); [4347] (KCl+Ga); [780] (щелочногаллоидные соединения); [4368] (галогениды серебра); [4422] (CdS); [4432] (интерметаллические полупроводники, содержащие щелочные металлы); [4442] (CdTe); [4490] (CdAs₂); [4491] (II—V); [4439] (PbTe); [4502, 4503] (PbTe, PbS); [4504, 4505] (PbTe); [4577] (иодиды щелочных металлов); [4578] (AgBr); [4629] (Bi₂Te₃); [4631] (фосфат галлия); [4646] (AgBr); [4658, 4659] (щелочногаллоидные соединения); [4665] (щелочногаллоидные соединения); [4705] (Mg₂Sn); [4707] (хромовые квасцы); [4734] (щелочногаллоидные соединения); [4738] (оксидные полупроводники); [4796] (соли Pb); [4797] (PbTe, PbSe); [4829] (HgSe); [4835] (KCl+Ti); [4870] (PbS); [4874] (CdO); [4878] (PbTe); [4886] (оксидные полупроводники); [4894] (MgO, NiO); [4899] (TiO, NiO).

Щелочные и благородные металлы: [949] (Au); [955] (Ag); [958] (Au); [1026] (Cu); [1141] (Cu); [1192, 1193] (Cu, Ag); [1199] (Cu); [1250] (Cu); [1254, 1255] (Cu, Ag, Au); [1256] (Cu); [1287] (Ag); [1288] (благородные металлы); [1325] (Cu); [1393] (Cu); [1469] (щелочные металлы); [1509] (Ag, Cu); [1596] (щелочные и благородные металлы); [1617] (благородные металлы); [1642] (сплавы серебра); [276] (Au, Ag); [1690] (Cu, Au); [1694] (Na); [1726]

(щелочные металлы); [1743] (Cu); [1763] (щелочные металлы); [1780] (Cu); [308] (Ag); [1879] (Cu); [1882] (Li, Na, K); [1906] (Ag); [1935] (Ag, Cu); [358, 360] (Cu); [361] (Cu, Ag); [362] (Au); [2017] (Cu); [2097] (Cu, Ag, Au); [2178] (Cu); [2183] (Au); [2210] (щелочные металлы); [2211] (Cu); [2293] (Cu); [438] (щелочные металлы); [441] (щелочные металлы); [2319] (щелочные и благородные металлы); [2327] (Ag); [2359] (щелочные металлы); [2364] (Na); [2375] (Na, K); [2393] (Rb, Cs); [2492] (Cu); [2493] (Na, Mg, Al); [2569] (Na); [2623] (Na); [2730] (Cu); [2731] (Ag); [2736] (одновалентные металлы); [2817, 2820] (одновалентные металлы); [2895] (Cu); [2914, 2918] (Cu); [2981] (Cu); [3130] (Cu); [3173] (Cu); [3174] (Au); [3340] (Cu); [3399] (щелочные металлы); [3404] (щелочные металлы); [3518, 3520] (сплавы Au); [653] (Na); [3609] (Cu); [3640, 3641] (Cu); [3643, 3644] (Au, Ag); [3645] (благородные металлы); [3774] (Rb); [3782] (Cu); [3788] (Cu); [3800] (Cu); [3848] (Cu); [3852] (Ag, Au); [3946] (Cu); [3979] (Cu); [3983] (Cu); [4010] (Cu, Ag, Au); [4061] (Cu); [4114] (Cu); [4195] (Li); [4242] (одновалентные металлы); [4289] (Cu, Ag, Au); [4302] (Cu); [4303, 4306] (Cu, Ag, Au); [4434] (CsAu); [4437] (Cu); [4494] (Li—Mg); [4541, 4542, 4545] (благородные металлы); [4612] (благородные металлы); [4630] (Au—Cr); [4633] (K); [4686] (одновалентные металлы); [4880] (Ag); [892] (щелочные металлы); [4952] (Cu); [4953] (щелочные металлы).

Двухвалентные и трехвалентные металлы: [956] (Cd, Zn, Tl); [960] (Zn); [974] (Ca); [990] (Hg); [1027] (Al); [1091] (Al); [1158] (Al); [1195] (Cd); [1196] (Zn); [1217] (In); [1218] (Al); [1325] (Mg); [1341] (Ga, Hg); [1349] (In); [1526] (In); [1573] (Mg); [1626] (Ca); [1691] (Cd); [1698] (Mg); [1723] (Cd, Zn); [1939] (Al); [2018—2020] (Al); [2021] (Mg, Zn, Cd); [2088—2090] (Al, In); [2097] (Al); [2170] (Zn); [2193, 2194] (Al); [2199] (Zn); [2202] (Cd); [2234] (Cd); [2249] (Zn); [2250] (Zn, Cd); [440] (Sr, Ba); [2346] (Mg); [2374] (Al); [2378] (Cd); [2400] (Al); [2527] (Mg, Al); [2761] (Zn); [2809] (Al); [2726] (Zn, Cd); [2727] (Zn); [2766] (Al); [3163] (Zn, Cd); [3167] (Cd); [3172] (Al); [3263] (Cd, Zn); [3235] (Be); [3270] (Al); [3420] (Cd); [3423] (Tl); [653] (Ba); [3559] (Al); [3619] (Al); [3688] (Zn); [4011] (Al); [4012] (Mg); [4064] (In); [4066, 4067] (Tl); [4076, 4077] (Ga, Zn); [4104] (Al); [4105] (Ga); [4276] (B); [4298] (Al); [4419] (Tl); [4444] (Al); [4453] (Mg); [4454] (Zn); [4455] (Mg); [4456] (Zn); [4776] (In); [4902] (Ga); [4923] (Cd).

Зд-металлы и металлы других переходных групп: [975] (Zr); [988] (Fe); [1141, 1142] (Fe); [1321] (группа Fe); [1326] (Cr); [1348, 1350] (металлы группы Cr); [285—288] (Ni); [1738] (переходные элементы); [1756] (W); [1938] (Ni); [363] (W); [2023] (переходные металлы); [2024—2026] (W, Cr, Mo); [2027] (Mo, W); [2082] (Fe); [2083] (Ti, V, Cr, Mn); [2097] (Pd, Pt, Zr, W, Mo, Ta, Nb); [2233] (Ni); [2477] (Cr); [2728] (Ni); [2729] (Re); [2909] (Fe); [3073] (Ni); [3323] (Cr); [3324] (Mo); [3479] (Ni); [3488] (Ni); [3735] (Fe).

Графит: [1020, 1022, 1197, 1334, 1894, 2198, 2442, 2655, 2923, 3194, 623, 3304, 3392—3394, 3672, 3752, 4415—4418, 4446, 4546, 4579].

Висмут: 900, 903, 959, 1035, 1037, 1055, 1061, 1103, 1336—1338, 1351—1355, 1412, 1413, 258, 1600, 1628, 1789, 1911, 1967, 1984, 1989, 2006, 2197, 2200, 48, 2271, 2272, 2363, 2509, 2510, 2523, 2533, 2582, 2585, 2676, 545, 547, 2799, 2861, 2863, 2877, 2897, 2898, 3031, 3193, 3199, 3264, 3265, 3267, 3498, 3499, 3541, 3630, 3772, 3803, 3941, 4084, 4085, 4089, 4179, 769, 770, 4374, 4376, 4377, 4462, 4586, 4645, 4675, 4736, 4755, 4776, 4825].

Другие металлические элементы: [952, 954] (Sn); [953] (Pb); [961] (Sn); [990] (Sn); [1036] (Pb); [1198] (As); [1215] (Sn); [1216] (Pb); [1325] (Pb); [1355] (Sb); [1379] (Pb); [1703—1705] (Sb); [1977] (Sb); [1979] (Sb); [1993] (Sn); [2002] (As); [2017] (Sn); [2114] (Sb); [2191] (Sn); [2291, 2292] (Pb); [2294] (Sn); [2385] (Sn); [2565] (Sn); [2740] (Sb); [2858] (Sb); [2872, 2873, 2876] (Sn); [2875] (Pb); [2892] (Sn); [2980] (Sn); [3420] (Pb); [3422] (Pb, Sn); [3424] (Pb); [3611] (Pb); [3784, 3785, 3787] (Sn); [3831] (Pb);

[3850] (Pb); [3940] (Sn); [4041] (Sb); [4178, 4180] (Sb); [4228] (Pb); [4297] (Sb); [4463] (Sb); [4776] (Sn); [4825] (Sb); [4909] (Pb).

Металлические сплавы и соединения: [1224] (латунь); [1231] (Au—Pt); [1269] (сплавы Cu); [1320] (Fe—Cr); [1517] (ZnSb); [1549] (Fe—Co+Mn); [1619] (Ni—Cu, Pd—Ag); [1620] (сплавы переходных металлов); [1642] (сплавы Ag); [1688] (сплавы Cu, Au, Pd); [1695] (металлические InSb, InTe); [1748] (HgTe—MnTe); [1941] (сплавы Ni—Cu—Fr); [2080] (Co—Ni); [2081] (пермаллой); [2084] (Ni₃Mn, Fe—Co); [2232, 2233] (сплавы Ni и Co); [2342] (SiC); [2525] (Zn—Mn); [2526] (сплавы Zn); [2530] (окислы переходных металлов+Li); [2608] (Ag—Au); [543] (γ -фаза и другие сплавы); [2800] (Bi—Sb); [2853] (Ag—Pd, Ag—Cd); [2854] (сплавы Cu); [2888] (сплавы Ag); [569] (Cu—Zn); [3258] (Al—Zn); [3266] (Fe—Cr); [3306] (сплавы благородных металлов); [3340] (Cu₃Au); [642] (Cu—Zn); [3425] (вольфрамовые бронзы); [3518, 3520] (сплавы Au); [3531] (V₃X); [3563] (сплавы In); [3629] (InSc); [681] (Cu—Ni); [685] (Cu—Zn); [3688] (латунь); [3714] (Fe—Co); [3783] (сплавы Cu); [3801] (Ni—Pd); [3849] (структура NiAs); [4063] (Cu—Ge); [4107] (сплавы Au); [4184] (сплавы Mg); [4226] (Cu—Ni); [4233] (Cr—Fe, Cr—V); [4434] (Cs—Au); [4494] (Li—Mg); [4630] (Au—Cr); [4681] (SiC); [4713] (SiC); [4749] (SiC); [4757] (сплавы Mg); [4810] (Bi—Te); [4907] (Cu—Mn).

ТЕОРИИ КРИСТАЛЛОВ-ДИЭЛЕКТРИКОВ ПО ДРУДЕ — ЛОРЕНТЦУ И ЭВАЛЬДУ

§ 1. Теория оптической дисперсии по Друде и Лорентцу

Как отмечалось в гл. 1, § 1, основы электронной теории твердого тела были заложены около 1900 г. Друде и Лорентцем. В предыдущих главах рассматривалась электропроводность металлов при наложении постоянных электрического и магнитного полей; мы видели при этом, что работа Друде и Лорентца легла в основу дальнейших исследований. Однако главная часть этой работы касалась не постоянных внешних полей, а переменных электромагнитных полей, в частности света. Цель ее состояла в том, чтобы найти атомистическое объяснение диэлектрической проницаемости, коэффициента преломления и коэффициента поглощения как металлов, так и изоляторов (диэлектриков). Согласно Друде и Лорентцу, явления в диэлектриках обусловлены колеблющимися диполями. Входящие в них электроны удерживаются в положениях равновесия в атомах линейными возвращающими силами и испытывают также силы сопротивления. Электрическое поле создает силу, приводящую электроны в движение. Как мы видели в предыдущих главах, подобным же образом описывалось и явление электропроводности: вводилось представление о свободных электронах, ускоряемых полем и испытывающих силы сопротивления, но не испытывающих линейных возвращающих сил, которые существуют в диэлектриках. В настоящей главе будут рассмотрены диэлектрики, в которых имеются линейные осцилляторы, а не свободные электроны.

Вспомним прежде всего уравнения Максвелла и то, каким образом входят в них диэлектрическая проницаемость и электропроводность. Мы будем следовать общему характеру изложения книги [1], к которой и отсылаем читателя для дальнейшего изучения¹⁾. Как и в указанной книге, мы будем пользоваться системой МКС, указав в нужный момент, как перейти в окончательных уравнениях к несколько более привычной гауссовой системе.

Уравнения Максвелла содержат четыре векторные величины E , D , B и H , из которых E и D относятся к электрическому

¹⁾ См. также книги С. Г. Калашникова [13] и И. Е. Тамма [14]. — *Прим. ред.*

полю, а \mathbf{B} и \mathbf{H} — к магнитному. Каждая из этих величин представляет собой векторную функцию координат и времени. Они определяются уравнениями через объемную плотность электрического заряда ρ и плотность электрического тока \mathbf{J} ; первая из этих величин — скалярная, вторая — векторная функция координат и времени. Эти функции предполагаются заранее заданными. Уравнения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{B} &= 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, & \operatorname{div} \mathbf{D} &= \rho. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Этих уравнений еще недостаточно, чтобы определить поля по плотностям заряда и тока. Максвелл ввел следующие дополнительные равенства, иногда называемые материальной системой и отражающие свойства среды, в которой находятся заряды и токи:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad \mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}. \quad (4.2)$$

Здесь ϵ — диэлектрическая проницаемость, μ — магнитная проницаемость, σ — удельная электропроводимость среды. В гауссовой системе единиц величины ϵ и μ безразмерны. Однако в системе МКС мы имеем

$$\epsilon = \kappa_e \epsilon_0, \quad \mu = \kappa_m \mu_0, \quad (4.3)$$

где κ_e и κ_m — безразмерные диэлектрическая и магнитная проницаемости, а ϵ_0 и μ_0 — некоторые числа [1].

Если в уравнения (4.1)–(4.3) подставить экспериментальные значения трех величин κ_e , κ_m и σ , то этих уравнений оказывается достаточно для того, чтобы предсказать, какие поля будут вызваны данными зарядами и токами. Однако, как было сказано выше, такой подход не удовлетворял Друде и Лорентца. Названные авторы предпочитали рассматривать диэлектрические и магнитные эффекты, а также и электропроводность, как результат движения электронов. В пустом пространстве $\kappa_e = \kappa_m = 1$, а $\sigma = 0$. Задача состояла в том, чтобы для среды, содержащей электроны, выразить указанные величины в виде суммы их значений в пустом пространстве и добавочных членов, обусловленных движением электронов. Эта задача представляла отнюдь не чисто академический интерес. Максвелл предположил, что три «материальные» константы действительно постоянны. Опыт показал, однако, что фактически все они зависят от частоты и притом так, что напрашивалось предположение об осцилляторах, характеризующих своими собственными частотами. Объяснение этого явления, названного для случая

зависимости κ_e от частоты аномальной дисперсией, было одной из главных задач, которые поставили перед собой Друде и Лорентц.

В настоящей главе мы будем рассматривать диэлектрики, для которых можно положить $\kappa_m = 1$, или $\mu = \mu_0$ и $\sigma = 0$. Предположим, однако, что в диэлектрике имеются электрические диполи, приводимые в колебание полем, причем дипольный момент единицы объема равен \mathbf{P} , т. е. сумме всех зарядов в единице объема, умноженных на их смещения. Величина \mathbf{P} , называемая поляризацией, представляет собой еще одну векторную функцию координат и времени. Она приводит к появлению плотности заряда, равной $\rho' = -\text{div } \mathbf{P}$, и плотности тока $\mathbf{J}' = -\partial \mathbf{P} / \partial t$. Эти плотности заряда и тока нужно добавить к плотностям ρ и \mathbf{J} в уравнениях (4.1); последние величины иногда называют свободными зарядом и током, а ρ' и \mathbf{J}' — связанными, ибо они обусловлены электронами, связанными в атомах¹⁾. Мы не вводим теперь отличной от единицы величины κ_e , предполагая, что все отличие среды от пустого пространства состоит в наличии связанного заряда и тока.

Уравнения Максвелла теперь принимают вид

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, & \text{div } \mathbf{B} &= 0, \\ \text{rot } \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \mathbf{J}' + \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{J} + \frac{\partial (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P})}{\partial t}, & (4.4) \\ \epsilon_0 \text{div } \mathbf{E} &= \rho - \text{div } \mathbf{P}, & \text{div } (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) &= \rho. \end{aligned}$$

Другими словами, если положить

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0 \left(1 + \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0 \mathbf{E}} \right) \mathbf{E}, \quad (4.5)$$

то получим два последних уравнения Максвелла в стандартном виде, но роль диэлектрической проницаемости играет величина

$$\kappa_e = 1 + \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0 \mathbf{E}}. \quad (4.6)$$

Чтобы найти ее, необходимо вычислить коэффициент пропорциональности между вектором поляризации и напряженностью поля. Здесь уместно отметить, что для перехода к гауссовым единицам в равенстве типа (4.6) следует положить $4\pi\epsilon_0 = 1$, или $\epsilon_0 = 1/4\pi$, так что в гауссовой системе равенство (4.6) принимает вид

$$\kappa_e = 1 + \frac{4\pi \mathbf{P}}{\mathbf{E}}. \quad (4.7)$$

¹⁾ В советской литературе термин «связанный ток» не употребляется. Говорят о связанном заряде и токе поляризации. — *Прим. ред.*

Далее Друде и Лорентц предположили, что диэлектрик содержит в единице объема N электронов, движение каждого из которых подчиняется дифференциальному уравнению

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + mg \frac{d\mathbf{x}}{dt} + m\omega_0^2 \mathbf{x} = -e\mathbf{E}. \quad (4.8)$$

Здесь $(-e)$ — заряд и m — масса электрона, \mathbf{x} — смещение, g — коэффициент трения, а ω_0 — резонансная угловая частота, описывающая возвращающую силу, пропорциональную смещению. Пусть \mathbf{E} и \mathbf{x} изменяются как $\exp(i\omega t)$ (причем в конечном результате следует взять вещественную часть этого выражения). Тогда

$$\mathbf{x} = - \frac{(e/m) \mathbf{E}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega g}, \quad (4.9)$$

и поляризация составляет

$$\mathbf{P} = \mathbf{E} \frac{Ne^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega g}. \quad (4.10)$$

Следовательно,

$$\kappa_e = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega g}. \quad (4.11)$$

Если имеется набор осцилляторов разных типов, обладающих разными резонансными частотами, и число осцилляторов k -го типа равно N_k , то соответствующее выражение принимает вид

$$\kappa_e = 1 + \sum_k \frac{N_k e^2/m\epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k}. \quad (4.12)$$

Величины ω_k и g_k относятся теперь к k -му типу электронов.

Формула (4.12) для диэлектрической проницаемости хорошо согласуется с опытом. По существу она эквивалентна формуле Зельмейера, предложенной очень давно. Тот факт, что диэлектрическая проницаемость комплексна, приводит к тому, что в \mathbf{D} или \mathbf{P} содержатся члены, находящиеся как в фазе, так и в противофазе с \mathbf{E} . Это в свою очередь ведет к поглощению электромагнитной волны. Чтобы убедиться в этом, вычислим с помощью уравнений Максвелла напряженности электрического и магнитного полей в плоской волне. Начнем с уравнений (4.1), положив в них \mathbf{J} и ρ равными нулю (хотя \mathbf{J}' и ρ' не равны нулю), затем используем (4.2). Будем считать, что величина κ_e постоянна во всем пространстве, так что мы получим плоскую волну в бесконечной среде. Применим к первому из уравнений (4.1) операцию rot и используем векторное тождество

$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E}$. Поскольку $\text{div } \mathbf{D} = 0$, то и $\text{div } \mathbf{E} = 0$. Далее, $\text{rot } \mathbf{B}$ можно найти из уравнения $\text{rot } \mathbf{H} = \partial \mathbf{D} / \partial t = \kappa_e \epsilon_0 \partial \mathbf{E} / \partial t$ (так как $\mathbf{J} = 0$), используя соотношение $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$. Объединив эти результаты, найдем

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \kappa_e \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (4.13)$$

Мы получили волновое уравнение для \mathbf{E} . Простейшее решение его имеет вид

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp \left[i\omega \left(t - \frac{x}{v} \right) \right], \quad (4.14)$$

где скорость распространения v определяется выражением

$$v = \frac{1}{\sqrt{\kappa_e \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c}{\sqrt{\kappa_e}}. \quad (4.15)$$

Здесь c — скорость света в пустоте, равная

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}. \quad (4.16)$$

Комплексность величины κ_e означает, что и скорость распространения v также комплексна. Вещественная часть величины $1/v$ приводит к синусоидальной волне, а мнимая часть характеризует затухание в направлении x , т. е. поглощение электромагнитной волны. Из формулы (4.12) видно, что если угловая частота ω далека от любой из резонансных частот ω_h и если константы затухания g_h малы, то мнимые части в знаменателях (4.12) будут малы по сравнению с вещественными частями, в результате будет мала мнимая часть скорости и затухание волны будет слабым. С другой стороны, если мы находимся вблизи резонанса, так что ω почти совпадает с одной из частот ω_h , один из знаменателей становится очень малым и мнимым. В этом случае будет иметь место сильное затухание. Задача о распространении волн описана более подробно в книге [1] (гл. IX) ¹⁾. Пренебрегая затуханием, можем написать

$$\frac{1}{v} = \frac{n}{c}, \quad (4.17)$$

где коэффициент преломления n определяется выражением

$$n = \sqrt{\kappa_e}. \quad (4.18)$$

В цитированной выше книге соответствующие формулы приводятся для случая, когда нельзя пренебрегать затуханием.

¹⁾ См. примечание на стр. 112. — *Прим. ред.*

Все эти результаты хорошо известны, и мы получили их главным образом для того, чтобы иметь под рукой формулы, необходимые для дальнейшего. Известно также, что Лорентц [1] и почти одновременно другой исследователь, по случайному совпадению носивший имя Лоренц [2], расширили теорию, получив так называемую поправку Лорентц — Лоренца.

Мы рассмотрим ее в следующем параграфе.

§ 2. Поправка Лорентц — Лоренца

Записывая равенства (4.8) — (4.10), мы молчаливо предполагали, что сила, действующая на заряд $-e$, вызывая образование одного из диполей, составляет $-eE$. Лорентц, однако, высказал мысль, что следует придерживаться более микроскопического подхода к вопросу. Мы полагаем, что в микроскопическом, или атомном, масштабе напряженность поля E изменится от точки к точке внутри каждой ячейки кристалла, а поле E , фигурирующее в уравнениях Максвелла, получается из микроскопического путем усреднения по пространству. Лорентц поставил вопрос: очевидно ли, что поле, действующее на диполь, равно этому среднему значению? Не может ли оказаться, что диполи находятся в особых положениях, в которых поле отличается от среднего?

Он пояснил ситуацию рассуждением, которое мы приведем в упрощенном виде. Пусть внутри диэлектрика вырезана полость. Очевидно, поле, действующее на частицу в центре полости, зависит от формы последней. Так, в книге [11] (гл. IV, § 7) указано, что в случае длинной иглообразной полости, направленной вдоль напряженности электрического поля, значение E в центре полости такое же, как и внутри диэлектрической среды. В центре же плоской дискообразной полости с осью диска, направленной вдоль поля, напротив, поле составляет D/ϵ_0 , или $E + P/\epsilon_0$. Различие обусловлено полем, создаваемым поверхностными зарядами, которые появляются на поверхности полости вследствие обрыва диэлектрика на ней. Так, в центре сферической полости поле составляет

$$\begin{aligned} E + \frac{1}{3} \frac{P}{\epsilon_0} & \text{ в единицах МКС,} \\ E + \frac{4\pi P}{3} & \text{ в гауссовых единицах,} \end{aligned} \tag{4.19}$$

как показано в книге [11] (гл. IX, § 2).

Лорентц высказал мысль, что положение атома в жидкости или в твердом теле гораздо больше напоминает положение

в центре сферической полости, чем в иглообразной. Другие атомы, естественно, находятся вне рассматриваемого атома, и если бы он был сферическим, то они находились бы вне сферического поля его сил. Фактически Лорентц использовал гораздо более сложное рассуждение, но он пришел к тому же выводу. Поскольку вскоре мы решим ту же задачу более строгим путем, не будем пытаться сейчас улучшить это рассуждение. Конечный итог рассуждения Лорентца свелся к замене равенства (4.10) на

$$\mathbf{P} = \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \right) \sum_k \frac{N_k e^2 / m}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k}. \quad (4.20)$$

Это означает, что поле, поляризующее диполи, равно $\mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0$.

Если вместо (4.10) принять (4.20) и объединить это выражение с (4.6), то, поделив на $\epsilon_0 \mathbf{E}$, получим

$$\kappa_e - 1 = \left(1 + \frac{\kappa_e - 1}{3} \right) \sum_k \frac{N_k e^2 / m \epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k},$$

или

$$\frac{\kappa_e - 1}{\kappa_e + 2} = \frac{1}{3} \sum_k \frac{N_k e^2 / m \epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k}. \quad (4.21)$$

Это равенство обсуждается в книге [11] (гл. IX, § 2)¹⁾, где указано, что оно лучше согласуется с экспериментом, чем первоначальное соотношение (4.12). Вообще считается, что оно дает хорошее объяснение многих особенностей диэлектриков.

Существует, однако, ряд фактов, которые никак не укладываются в формулу типа (4.21). Наиболее поразительный из них — двойное лучепреломление. В некубических кристаллах диэлектрическая проницаемость, или показатель преломления, оказывались различными для разных направлений электрического поля. Это явление, чрезвычайно важное для практической оптики, было в то время, о котором мы пишем, хорошо известно и хорошо описано. Используя феноменологический подход, его можно объяснить, если записать связь между векторами \mathbf{D} и \mathbf{E} не как скалярное соотношение вида (4.2), а в тензорной форме:

$$\begin{aligned} D_x &= \epsilon_{xx} E_x + \epsilon_{xy} E_y + \epsilon_{xz} E_z, \\ D_y &= \epsilon_{yx} E_x + \epsilon_{yy} E_y + \epsilon_{yz} E_z, \\ D_z &= \epsilon_{zx} E_x + \epsilon_{zy} E_y + \epsilon_{zz} E_z. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Разумеется, величины ϵ_{ij} должны быть связаны некоторыми соотношениями, задаваемыми условиями симметрии кристалла.

¹⁾ См. примечание на стр. 112. — *Прим. ред.*

Именно соотношения этого типа исследовались в книге Фогта, цитированной в гл. 1, § 1. Очевидно, равенство (4.21), приводящее в том виде, в каком оно записано, к скалярной диэлектрической проницаемости, не может объяснить соотношений вида (4.22).

Естественно встал вопрос, каким образом возникает тензорная связь между векторами \mathbf{D} и \mathbf{E} , приводящая к явлению двойного лучепреломления. Можно было предложить два взаимно исключаящих явления: либо индивидуальные диполи не изотропны и обладают различной поляризуемостью в разных направлениях, либо существует нечто в их расположении в некубическом кристалле, что приводит к этому эффекту. Отчасти для ответа на этот вопрос Эвальд¹⁾ в своей докторской диссертации в 1912 г. провел исследование оптических свойств твердых тел при помощи гораздо более фундаментального метода, чем тот, которым пользовались Друде и Лорентц. Последние авторы не использовали чисто атомный подход. Они рассматривали рассеяние электромагнитного излучения веществом как результат наличия ряда диполей, представляющих собой рассеивающие центры. Сами эти диполи, однако, не рассматривались с микроскопической точки зрения. Эвальд, напротив, предположил, что диполи образуют пространственную решетку, и сделал такое предположение, смог довести свою теорию до гораздо более элегантного вида, чем у Друде и Лорентца. Он предположил, что диполи расположены анизотропно, и попытался выяснить, нельзя ли таким путем объяснить двойное лучепреломление, не предполагая анизотропии поляризуемости индивидуальных диполей. Очевидно, что если величина силы, действующей на диполь, не равна $\mathbf{E} + \mathbf{P}/\epsilon_0$, а будет различной для разных направлений, то в наших руках окажутся все данные для построения теории двойного лучепреломления. Такая возможность кажется вполне естественной. Если, например, окружение атома имеет эллипсоидальную симметрию, то из примеров, которые мы привели, очевидно, что на диполь будет действовать разная сила в зависимости от того, вдоль какой из осей эллипсоида направлено поле. Было бы довольно легко построить такую теорию для атомов, расположенных в центрах эллипсоидов, но это не удовлетворяло Эвальда. Он хотел рассмотреть настоящую решетку, состоящую из диполей, и вычислить поле, которое фактически действует на один из них, вызывая его поляризацию. В следующем параграфе мы перейдем к рассмотрению метода Эвальда.

¹⁾ См. также [3].

§ 3. Теория поляризации диэлектрических кристаллов по Эвальду

Метод Эвальда был прямым. Он предположил, что диполи расположены в узлах решетки Бравэ, которую он принял орторомбической, но которую мы можем с равным успехом считать и произвольной решеткой Бравэ. Эвальд предположил, что на элементарную ячейку приходится по одному диполю, но задачу легко обобщить и на случай нескольких диполей в ячейке — по одному на каждый тип атома. Далее Эвальд предположил, что все диполи колеблются синусоидально, причем их фазы меняются от ячейки к ячейке, как в затухающей плоской волне, и вычислил поле, создаваемое всеми диполями, решая соответствующие уравнения Максвелла. Затем он использовал условие самосогласования, по существу эквивалентное равенству (4.20): поляризация, устанавливающаяся в диполе, должна быть равна поляризации, создаваемой полем, приложенным к той точке, где действительно находится диполь. Иначе говоря, разница между расчетом Эвальда и рассуждениями предыдущего параграфа, состоит в том, что Эвальд строго решил уравнение Максвелла для поля, действующего в решетке диполей, и строго вычислил это поле в точке, где находится один из диполей.

Чтобы выполнить эту программу, в первую очередь нужен удобный способ вычисления поля колеблющихся диполей. Такой способ дается известным решением уравнений Максвелла, полученным Герцем, тем самым решением, которое привело Герца к идее о распространении радиоволн, испускаемых дипольной антенной. Решение Герца (в единицах МКС) состоит в следующем. Введем вектор Герца \mathbf{Z} , векторную функцию координат и времени, через которую векторы \mathbf{E} и \mathbf{B} определяются как

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \text{rot rot } \mathbf{Z} + \nabla^2 \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2}, \\ \mathbf{B} &= \frac{1}{c^2} \text{rot } \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial t}.\end{aligned}\quad (4.23)$$

Можно убедиться, что определенные таким образом векторы \mathbf{E} и \mathbf{B} автоматически удовлетворяют первым двум уравнениям Максвелла $\text{rot } \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$ и $\text{div } \mathbf{B} = 0$, а с учетом (4.2) и при условии

$$\begin{aligned}\rho &= \varepsilon \text{div} \left(\nabla^2 \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2} \right), \\ \mathbf{J} &= -\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla^2 \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2} \right),\end{aligned}\quad (4.24)$$

они удовлетворяют и двум вторым из уравнений (4.1). Мы будем использовать эти решения для пустоты, так что $\epsilon = \epsilon_0$, и, как и в предыдущих параграфах, получим диэлектрический эффект, складывая поля диполей. В этом случае плотности заряда и тока в соотношениях (4.24) суть те самые величины, которые мы обозначали ранее через ρ' и \mathbf{J}' .

Из (4.24) явствует, что в тех точках, где величины ρ и \mathbf{J} равны нулю, вектор \mathbf{Z} удовлетворяет волновому уравнению $\nabla^2 \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2} = 0$. Будучи заинтересованы в отыскании поля точечных диполей, мы имеем то преимущество, что \mathbf{Z} будет удовлетворять волновому уравнению везде, кроме точек, где находятся диполи. Далее можно получить следующее выражение для вектора Герца, описывающего поле диполя, помещенного в пустоте в начале координат и колеблющегося так, что его дипольный момент представляет собой вещественную часть выражения $M \exp(i\omega t)$, т. е.

$$\mathbf{Z} = \frac{M}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp[i\omega(t - r/c)]}{r}. \quad (4.25)$$

Здесь r — расстояние от начала координат, где помещен диполь, до точки, в которой вычисляется поле. Вектор Герца \mathbf{Z} направлен так же, как и диполь. Если все диполи, интересующие нас, ориентированы в одном направлении, как это предполагается в случае Эвальда, мы можем везде оперировать только с абсолютной величиной вектора Герца, которая удовлетворяет скалярному волновому уравнению. Значения этих величин для разных диполей складываются алгебраически, и нам придется иметь дело с разными направлениями в пространстве только на последнем этапе расчета, когда в соответствии с (4.23) мы будем определять по \mathbf{Z} напряженности электрического и магнитного полей. Другими словами, мы получаем возможность свести векторную задачу к скалярной, что чрезвычайно сокращает математические выкладки.

В правильности решения (4.25) можно убедиться следующим путем. Прежде всего легко проверить, что эта функция удовлетворяет волновому уравнению; известно, что функция $\exp[i\omega(t - r/c)]/r$ есть решение скалярного волнового уравнения, и этого достаточно, чтобы вектор \mathbf{Z} был решением векторного волнового уравнения. Далее можно показать, что это решение действительно есть решение для диполя, исследуя его поведение в предельном случае $r \rightarrow 0$. Можно либо с помощью предельных соотношений для вектора Герца и выражений (4.24) получить плотности заряда и тока, либо с помощью формул (4.23) вычислить компоненты электрического и магнитного

полей и показать, что они действительно имеют вид, характерный для диполя. Если это проделать, то компоненты поля окажутся точно такими, как в книге «Электромагнетизм» [гл. XII, формула (3.5)] компоненты электрического и магнитного полей, окружающих колеблющийся диполь¹⁾. В сферических координатах эти компоненты имеют вид

$$\begin{aligned} E_r &= \frac{Mk^3}{4\pi\epsilon_0} \exp[i(\omega t - kr)] \cos \theta \left[\frac{2i}{(kr)^2} + \frac{2}{(kr)^3} \right], \\ E_\theta &= \frac{Mk^3}{4\pi\epsilon_0} \exp[i(\omega t - kr)] \sin \theta \left[-\frac{1}{kr} + \frac{i}{(kr)^2} + \frac{1}{(kr)^3} \right]; \\ H_\varphi &= \frac{i\omega Mk^2}{4\pi} \exp[i(\omega t - kr)] \sin \theta \left[\frac{i}{kr} + \frac{1}{(kr)^2} \right], \end{aligned} \quad (4.26)$$

где $k = \omega/c$. Формулы (4.26) подробно обсуждаются в цитированной главе. Из сравнения выражений (4.26) с формулой (4.25), содержащей столько же информации, видно, насколько проще в таких задачах пользоваться вектором Герца.

Далее допустим, что диполи расположены в узлах $\mathbf{R}_n = n_1 t_1 + n_2 t_2 + n_3 t_3$ решетки Бравэ и что их фазы соответствуют фазе плоской электромагнитной волны в данном узле решетки. Принимая во внимание возможность поглощения волны, мы должны считать волновой вектор комплексным. Поэтому вместо того, чтобы представлять его в виде ω/v , как это следует из (4.14), мы будем записывать такую затухающую волну как

$$\exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\}, \quad (4.27)$$

где \mathbf{k}_r и \mathbf{k}_i — соответственно вещественная и мнимая части волнового вектора, а \mathbf{r} — радиус-вектор. В \mathfrak{E} «Электромагнетизм» (гл. X, § 7)¹⁾ показано, что векторы \mathbf{k}_r и \mathbf{k}_i не обязательно имеют одинаковое направление, но для нашей цели можно не вдаваться в такие сложности.

Пусть, далее, в каждом узле решетки \mathbf{R}_n находится диполь, для которого вектор Герца определяется выражением (4.25), но с экспонентой и знаменателем следующего вида:

$$\frac{\exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{R}_n - (\omega/c) |\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|]\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|}. \quad (4.28)$$

Непосредственное суммирование таких выражений для бесконечного числа диполей решетки было бы практически невыполнимой задачей. Эвальд, однако, обошел ее следующим образом: он заметил, что вектор Герца \mathbf{Z} , рассматриваемый как функция пространственных координат, согласно (4.24), удовлетворяет во всем пространстве волновому уравнению, имея син-

¹⁾ См. также [14] и § 72 в [15]. — Прим. ред.

гулярности только в тех точках, где расположены диполи. Он знал, что по теореме Флоке, о которой говорилось в т. 2 [12]¹⁾, решение в таком случае можно получить в виде плоской волны, умноженной на периодическую функцию координат, повторяющуюся в каждой ячейке. Как известно, такую периодическую функцию можно разложить в тройной ряд Фурье, в котором волновые векторы — суть векторы обратной решетки:

$$\mathbf{K}_h = 2\pi (k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3). \quad (4.29)$$

Здесь $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ — базисные векторы обратной решетки. Иначе говоря, можно ожидать, что вектор \mathbf{Z} имеет вид

$$\mathbf{Z} = \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{A}(\mathbf{K}) \exp \{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r} - \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}]\}, \quad (4.30)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{K})$ — должным образом выбранные коэффициенты. В нашем случае, когда вектор \mathbf{Z} ориентирован параллельно всем диполям, векторы $\mathbf{A}(\mathbf{K})$ также будут ориентированы в том же общем для всех направлении. Задача о вычислении суммарного вектора Герца тем самым сводится к определению таких коэффициентов \mathbf{A} , чтобы выражение (4.30) удовлетворяло условиям (4.24) для рассматриваемой решетки.

Мы видим, что все фазы были выбраны так, что если вектор Герца правильно ведет себя около диполя в начале координат, то он будет правильным и около каждого узла решетки. Это ясно из того, что множитель $-i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}$, конечно, повторяется для каждого узла решетки, а множитель $-i(\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}$ меняется от узла к узлу так же, как фаза дипольных моментов в формуле (4.28). Следовательно, мы получим правильное решение, если вектор \mathbf{Z} из (4.30) правильно ведет себя около диполя в начале координат. Чтобы исследовать это поведение, заметим, что, поскольку плотность тока \mathbf{J}' составляет $\partial \mathbf{P} / \partial t$, а плотность заряда ρ' равна $-\text{div} \mathbf{P}$, мы можем переписать формулы (4.24) в следующем виде:

$$\nabla^2 \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2} = - \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0}. \quad (4.31)$$

Вектор поляризации \mathbf{P} в окрестности начала координат равен нулю всюду, кроме самого начала координат, где он обращается в бесконечность, так что интеграл от него по этой окрестности равен $\mathbf{M} \exp(i\omega t)$. Соответствующего поведения в начале координат следует ожидать и от вектора \mathbf{Z} . Прежде

¹⁾ См. также любое издание книги [16] или решение задачи об электроне в периодическом поле в любом курсе квантовой механики. — *Прим. ред.*

всего представим сам вектор поляризации в виде разложения типа (4.30). Положим

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{B}(\mathbf{K}) \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r} - \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}]\}, \quad (4.32)$$

где выражение

$$\sum_{\mathbf{K}} \mathbf{B}(\mathbf{K}) \exp(-i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}) \quad (4.33)$$

представляет собой функцию, которая равна нулю везде, кроме узлов решетки \mathbf{R}_n , но дает величину \mathbf{M} после интегрирования по окрестности любой из этих точек. Чтобы найти коэффициенты $\mathbf{B}(\mathbf{K})$, умножим (4.33) на величину, комплексно сопряженную с одной из плоских волн, например на $\exp(i\mathbf{K}'_h \cdot \mathbf{r})$, где \mathbf{K}'_h — один из векторов обратной решетки, и проинтегрируем по элементарной ячейке прямой решетки. Эта ячейка содержит узел, находящийся в начале координат. Поскольку функция $\exp(i\mathbf{K}'_h \cdot \mathbf{r})$ в этой точке равна единице, интеграл должен быть равен \mathbf{M} . С другой стороны, из стандартных условий ортогональности интеграл от $\exp[i(\mathbf{K}'_h - \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}]$, взятый по элементарной ячейке, равен нулю всегда, кроме случая $\mathbf{K}'_h = \mathbf{K}_h$, когда он равен объему ячейки Ω . Следовательно, мы имеем

$$\mathbf{B}(\mathbf{K}) \Omega = \mathbf{M}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{K}) = \frac{\mathbf{M}}{\Omega} \quad (4.34)$$

для любого значения \mathbf{K} .

Подставим теперь разложение (4.30) для \mathbf{Z} в уравнение (4.31). Получим

$$\nabla^2 \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2} = \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{A}(\mathbf{K}) \left[\frac{\omega^2}{c^2} - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}_h)^2 \right] \times \\ \times \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r} - \mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (4.35)$$

Это выражение должно быть равно величине $1/\epsilon_0$, умноженной на ряд (4.32), где коэффициенты $\mathbf{B}(\mathbf{K})$ определяются равенством (4.34). Приравнявая два эти выражения почленно, находим

$$\mathbf{A}(\mathbf{K}) \left[\frac{\omega^2}{c^2} - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}_h)^2 \right] = - \frac{\mathbf{M}}{\epsilon_0 \Omega}. \quad (4.36)$$

Отсюда можно найти векторы $\mathbf{A}(\mathbf{K})$, подставить их в формулу (4.30) и записать окончательное выражение для вектора Герца:

$$\mathbf{Z} = \sum_{\mathbf{K}} \left(- \frac{\mathbf{M}}{\epsilon_0 \Omega} \right) \frac{\exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}_h) \cdot \mathbf{r}]\}}{(\omega^2/c^2) - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}_h)^2}, \quad (4.37)$$

Это — окончательное решение задачи, но им неудобно пользоваться, так как ряд сходится медленно. В гл. 9, § 4, и в приложении 4 показано, как получить более быструю сходимость; таким образом мы приходим к практическим методам расчета.

Немало сведений можно получить, однако, рассматривая и непосредственно выражение (4.37). В данный момент нас интересуют оптические длины волн. При этом величины ω/c и k_r и k_i по порядку величины равны числу 2π , деленному на оптическую длину волны. С другой стороны, величины K_h — порядка 2π , деленного на межатомное расстояние. Следовательно, значения K_h в сотни и тысячи раз превышают k_r и k_i . Иначе говоря, знаменатель в выражении (4.37) для случая $K_h=0$ гораздо меньше, чем для всех других значений K_h . Это означает, что главную роль в выражении для Z играет слагаемое с $K_h=0$. Рассмотрим сначала только этот член. Он описывает плоскую волну с волновым вектором $k_r + ik_i$. Соответствующая напряженность поля практически не изменяется в пределах ячейки, если не считать очень малых изменений фазы, обусловленных большой, но конечной оптической длиной волны. Следует ожидать поэтому, что рассматриваемый член описывает обычное поле, которое возникло бы не для дискретного набора диполей, а для непрерывного распределения поляризации.

Чтобы убедиться в этом, предположим, что весь вектор Герца сводится только к одному главному члену

$$\mathbf{Z} = -\frac{\mathbf{M}}{\epsilon_0\Omega} \frac{\exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\}}{(\omega^2/c^2) - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)^2}, \quad (4.38)$$

и вычислим соответствующую напряженность электрического поля. Вместо того чтобы использовать сразу выражение (4.23) для \mathbf{E} , удобнее сначала преобразовать его с помощью векторного тождества

$$\text{rot rot } \mathbf{Z} = \text{grad div } \mathbf{Z} - \nabla^2 \mathbf{Z}.$$

Тогда

$$\mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2}.$$

Если бы в выражении для \mathbf{Z} содержался только главный член, то теория не объясняла бы появление двойного лучепреломления: при этом все векторы \mathbf{D} , \mathbf{E} и \mathbf{P} оказались бы параллельными друг другу. Как известно, в таком случае из уравнений Максвелла следует, что вектор электрического поля должен быть перпендикулярен волновому вектору. Следовательно, если векторы \mathbf{E} , \mathbf{P} , \mathbf{D} и \mathbf{M} направлены вдоль оси x , то вектор $k_r + ik_i$ не может иметь x -компоненты. Тогда при вычислении $\text{div } \mathbf{Z}$ мы должны учесть только член $\partial Z_x / \partial x$, так как \mathbf{Z} также будет

иметь только x -компоненту. Но поскольку $(\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)_x = 0$, функция (4.38) не будет зависеть от x , $\operatorname{div} \mathbf{Z}$ равна нулю и мы получим

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial t^2}.$$

Следовательно, учитывая временную зависимость, находим

$$\mathbf{E} = -\frac{\omega^2}{c^2} \frac{\mathbf{M}}{\epsilon_0 \Omega} \frac{\exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\}}{(\omega^2/c^2) - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)^2}. \quad (4.39)$$

Покажем теперь, что это — именно то выражение, которое мы и рассчитывали получить.

Проще всего убедиться в этом следующим образом. Пусть имеется один диполь с дипольным моментом

$$\mathbf{M} \exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{R}_n]\}, \quad (4.40)$$

расположенный в точке \mathbf{R}_n элементарной ячейки. Поскольку объем ячейки есть Ω , вектор поляризации, равный дипольному моменту единицы объема, равен

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{M}}{\Omega} \exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (4.41)$$

Мы ввели здесь непрерывную функцию координат, приводящую к правильному значению поляризации для каждой ячейки. Следовательно, выражение (4.39) можно переписать в виде

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{P}/\epsilon_0}{(c^2/\omega^2)(\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)^2 - 1}. \quad (4.42)$$

Но из соотношений (4.15) и (4.27) вытекает, что

$$\frac{c^2}{\omega^2} (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)^2 = \kappa_e. \quad (4.43)$$

Следовательно, выражение (4.42) сводится просто к соотношению

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{P}/\epsilon_0}{\kappa_e - 1}, \quad \mathbf{E}(\kappa_e - 1) = \frac{\mathbf{P}}{\epsilon_0},$$

т. е.

$$\kappa_e = 1 + \frac{\mathbf{P}}{\mathbf{E}\epsilon_0} \quad (4.44)$$

в соответствии с (4.6).

Теперь необходимо выяснить, чему соответствуют остальные члены в выражении (4.37), для которых $\mathbf{K}_h \neq 0$. Мы покажем, что они приводят к поправке Лорентца (когда она правильна). В общем случае эти дополнительные слагаемые описывают детальное поведение вектора Герца в пространстве.

Чтобы получить электрическое поле во всем пространстве, следует воспользоваться формулой (4.23). Затем надлежит найти поле в точке, где находится один из диполей, вычитая из него бесконечное поле, с которым диполь действует сам на себя. Поскольку истинное поле обращается на каждом диполе в бесконечность, мы видим, что ряд (4.37) в этих точках должен расходиться, в результате чего и возникает необходимость в специальных процедурах. Последние рассматриваются в гл. 9, § 4, и приложении 4 и составляют характерную черту метода Эвальда. Хотя подробности этого метода нам здесь не понадобятся, мы можем кратко изложить его суть. Эвальд заменяет точечные диполи непрерывным распределением поляризации с пиками гауссового вида около точек, отвечающих расположению диполей. Разложение для вектора Герца при этом не расходится, т. е. вектор Герца не обращается в бесконечность ни в одной точке. Фактически ширина гауссового распределения может быть выбрана такой, чтобы ряды, соответствующие (4.37), сходились значительно быстрее. Затем, чтобы учесть тот факт, что истинный потенциал обращается в бесконечность на диполях, добавляется еще одно распределение поляризации, равное распределению точечных диполей минус непрерывное распределение. Векторы Герца для обоих этих распределений очень быстро убывают с расстоянием, так что можно найти поправку к выражению вида (4.37) и получить правильную сумму, суммируя только по очень малому числу ближайших соседей.

Случай, рассматриваемый нами в приложении 4, относится к предельной электростатической задаче, но по существу он дает также и то, что нам требуется здесь. Это предельный случай, для которого величины ω/c , k_r и k_i пренебрежимо малы по сравнению с K_h . Можно показать, что тогда сумма всех членов разложения (4.37), за исключением главного, приводит к электрическому полю следующего вида:

$$\mathbf{E}' = \frac{\mathbf{M}}{\varepsilon_0 \Omega} \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (4.45)$$

Выражение (4.45) получено для точки кубической симметрии в кубическом кристалле. Оно относится к положению атома в простом кубическом, гранецентрированном или объемноцентрированном кубическом кристалле или к структуре алмаза, цинковой обманки или хлористого натрия. Объединяя это выражение с формулой (4.42), получаем, что электрическое поле в точках, где находятся атомы, для всех перечисленных случаев составляет

$$\text{Электрическое поле} = \frac{\mathbf{P}}{\varepsilon_0} \left[\frac{-1}{1 - (c^2/\omega^2)(\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)^2} + \frac{1}{3} \right]. \quad (4.46)$$

Далее можно продолжать, как и в случае (4.20); замечая, что, согласно (4.44), первое слагаемое в (4.46) есть обычное среднее электрическое поле E , получаем

$$P = \left(E + \frac{P}{3\epsilon_0} \right) \sum_k \frac{N_k e^2 / m}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k}. \quad (4.47)$$

Итак, мы пришли к тому же результату, что и в методе Лорентца — Лоренца.

Такое подтверждение результата Лорентца путем точного вычисления поля в точках, где находятся атомы, для кристаллов кубической симметрии представляет собой частный случай. Это — максимум того, что дает метод Лорентца, в то время как метод Эвальда можно применить также и к точкам, не обладающим кубической симметрией. Следовательно, по такой схеме можно рассчитать диэлектрические проницаемости кристаллов, различные в разных направлениях, а значит, получить и двойное лучепреломление. К сожалению, как отмечается в следующем параграфе, этот изящный метод, позволяющий в принципе получить весьма подробные сведения о двойном лучепреломлении, до сих пор использовался сравнительно мало.

§ 4. Теория дисперсии в изолирующих кристаллах

Прежде чем переходить к достижениям изложенной выше теории в применении к реальным кристаллам, мы должны установить ее связь с квантовой теорией атомной поляризации. Как известно¹⁾, дисперсионная формула Крамерса — Гейзенберга приводит к следующему квантовомеханическому выражению для наведенного дипольного момента, обусловленного N атомами в единице объема:

$$\text{Момент} = \sum_{n \neq m} \frac{N f_{mn} e^2 / m}{\omega_{nm}^2 - \omega^2}. \quad (4.48)$$

Здесь предполагается, что атомы находятся в m -м стационарном состоянии; сумма взята по всем стационарным состояниям (обозначаемым индексом n), в которые могут произойти переходы. Угловая частота ω_{nm} определяется из условия Бора для частоты перехода из одного состояния в другое $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$. Величина f_{mn} — так называемая сила осциллятора, которая дается выражением

$$f_{mn} = \frac{4\pi m \omega_{nm} (M_{nm})_x^2}{e^2 \hbar}, \quad (4.49)$$

¹⁾ См., например: Дж. С. Слэтер, Квантовая теория атомных структур, т. 1, изд-во «Мир», 1966, формула (6.57).

где M_x — x -компонента дипольного момента атома, а $(M_{nm})_x$ — матричный элемент этой величины между n -м и m -м стационарными состояниями атома. Формула (4.48) имеет тот же вид, что и (4.47), только величины N_x заменены на Nf_{mn} . Различие состоит лишь в том, что в (4.48) опущен член, описывающий затухание. Он рассматривается в гл. 6, § 11, книги, на которую мы сослались выше.

В соответствии с представлениями квантовой механики отдельному атому отвечают резонансные колебания, соответствующие осцилляторам со многими различными резонансными частотами. Каждый из них, вообще говоря, отвечает только доле того дипольного момента, которым обладал бы классический диполь. Иначе говоря, силы осцилляторов f_{mn} обычно меньше единицы (иногда гораздо меньше). Существует правило сумм, в соответствии с которым сумма величин f_{mn} для переходов из данного состояния во все возможные состояния одноэлектронного атома равна единице¹⁾. Вычисляя указанную сумму, мы должны иметь в виду, что, согласно (4.49), величины f_{mn} определены так, что они положительны для переходов из данного состояния в более высокое и отрицательны в противном случае. Если мы имеем атом с N электронами, то сумма величин f_{mn} равна полному числу электронов в атоме, N . Переходы, возможные в N -электронном атоме, включают не только оптические, но и рентгеновские переходы, в которых электроны поднимаются из рентгеновских уровней в непрерывный спектр. В простых случаях силы осцилляторов удается вычислить. Эта задача рассматривается в приложении 5, где приводится расчет атомной поляризуемости. Экспериментально значения f_{mn} можно измерить, наблюдая аномальную дисперсию и поглощение.

По-видимому, используя совместно силы осцилляторов f_{mn} и метод Эвальда, можно вычислить показатель преломления даже для кристалла некубической структуры. Классический расчет двойного лучепреломления был выполнен Брэггом [4] для кристаллов кальцита и арагонита. Кристаллы этого типа обладают очень низкой симметрией. Как известно из т. 2 этой серии [12]²⁾, группы CO_2 образуют равносторонние треугольники, лежащие в параллельных плоскостях кристалла. Ионы кислорода имеют максимальную поляризуемость, и величина показателя преломления обусловлена главным образом ими. Поэтому вполне естественно, что поведение рассматриваемых веществ должно быть совершенно различным для электрических полей,

¹⁾ См., например, [17]. — *Прим. ред.*

²⁾ См. также [18]. — *Прим. ред.*

лежащих в этих плоскостях и перпендикулярных им. Брэгг рассчитал влияние соседних поляризованных ионов на один из этих ионов, но не с помощью сложного метода Эвальда, а путем простых аппроксимаций, и получил результат, находящийся в хорошем согласии с экспериментом. Можно было бы пойти и гораздо дальше этих простых результатов Брэгга, но, по-видимому, задача о двойном лучепреломлении была не в моде в течение многих лет, и для интерпретации большого количества имеющегося экспериментального материала почти ничего не было сделано. Это типичный пример очень интересной области, в которой еще многое может быть сделано и о которой почти все забыли¹⁾.

Было исследовано большое количество простых случаев, когда справедлива формула для поправки Лорентца. Эти исследования представляли собой по существу обратный процесс, состоящий в том, чтобы по известному коэффициенту преломления, предполагая справедливость формулы Лорентца, восстановить поляризуемость или в более общем случае найти силы осцилляторов. Укажем, например, на обширное исследование Тессмана, Кана и Шокли [6], охватывающее большое количество кубических кристаллов, к которым должен быть применен метод Лорентца. Исходя из опыта, названные авторы определяли поляризуемости, пытаясь при этом использовать различные значения для поправки Лорентца, т. е. предполагая, что поправка составляет произведение P/ϵ_0 на константу, где константа не обязательно равна $1/3$. Они пытались выяснить, нельзя ли улучшить согласие с опытом путем подбора этого множителя, и нашли, что фактически точная лорентцева поправка дает по сравнению с любым другим множителем наилучший результат. Это сильный аргумент в пользу гипотезы Лорентца.

Некоторые исследования некубических кристаллов относятся к случаю сегнетоэлектриков. В этих интересных материалах, к которым мы вернемся в гл. 8, диэлектрическая проницаемость при нулевой частоте чрезвычайно велика, и фактически ниже определенной температуры материал спонтанно поляризуется. Мы можем пролить некоторый свет на природу этого механизма, решая задачу о лорентцевой поправке способом, отличным от того, которым мы пользовались выше. Наиболее просто это сделано в книге «Электромагнетизм» (гл. IX, § 2)²⁾. Вернемся к уравнению (4.8) и подставим лорентцеву поправку

¹⁾ См., например, [17], где продолжено исследование случая Брэгга.

²⁾ Этот метод и его обобщение на случай многих резонансных частот изложены в § 3b и 3c учебника [7]. Последний в некотором смысле представляет собой продолжение работы Друде.

прямо в это уравнение. Иначе говоря, перепишем его в виде

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + mg \frac{d\mathbf{x}}{dt} + m\omega_0^2 \mathbf{x} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \right). \quad (4.50)$$

Но вектор поляризации \mathbf{P} равен $-Nex$, где N — число диполей в единице объема. Следовательно, имеем

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + mg \frac{d\mathbf{x}}{dt} + m\omega_0^2 \mathbf{x} &= -e\mathbf{E} + \frac{Ne^2}{3\epsilon_0} \mathbf{x}, \\ m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + mg \frac{d\mathbf{x}}{dt} + m \left(\omega_0^2 - \frac{Ne^2}{3\epsilon_0 m} \right) \mathbf{x} &= -e\mathbf{E}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Другими словами, действие лорентцевой поправки здесь представлено как изменение резонансной частоты, так что вместо квадрата последней (ω_0^2) входит величина $\omega_0^2 - Ne^2/3\epsilon_0 m$. Если теперь член $Ne^2/3\epsilon_0 m$ окажется достаточно большим, то он может скомпенсировать ω_0^2 , в результате чего эффективная собственная частота может обращаться в нуль. Это и приводит к бесконечному показателю преломления (или бесконечной диэлектрической проницаемости) при нулевой частоте.

Фактически рассмотренный предельный случай никогда не реализуется. Обращаясь к возможным концентрациям диполей, их резонансным частотам и другим характеристикам реальных кристаллов, можно убедиться, что значения $Ne^2/3\epsilon_0 m$ порядка ω_0^2 практически недостижимы. Видно, однако, что если бы фактор Лорентца был изменен так, что вместо $1/3$ появилось бы большее число, то это помогло бы приблизить интересующие нас величины $Ne^2/3\epsilon_0 m$ к ω_0^2 .

В работе автора этой книги [8]¹⁾ было показано, что по крайней мере в некоторых сегнетоэлектриках расположение ионов таково, что фактор Лорентца, вычисленный по методу Эвальда, оказывается значительно больше $1/3$. В дополнение к этому имеется и другой источник поляризации, который мы до сих пор не принимали во внимание. Это — движение положительных и отрицательных ионов в противоположных направлениях под действием внешнего поля.

К этому явлению мы обратимся позднее, в гл. 7, где будут рассматриваться колебания решетки. Кажется вероятным, что сегнетоэлектрический эффект представляет собой в первую очередь эффект поляризации решетки указанного типа, усиленный фактором Лорентца, превышающим $1/3$. Но мы еще далеки от полного объяснения этого явления.

¹⁾ См. также [9, 10].

ЛИТЕРАТУРА

1. Lorentz H. A., Wied. Ann., 9, 641 (1880).
2. Lorenz L., Wied. Ann., 11, 70 (1880).
3. Ewald P. P., Ann. d. Phys., 49, 1, 117 (1916); 54, 519, 557 (1918).
4. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., A105, 370 (1924); A106, 346 (1924).
5. Lawless W. N., Devries R. C., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 1119 (1964).
6. Tessman J. R., Kahn A. H., Shockley W., Phys. Rev., 92, 890 (1953).
7. Försterling K., Hirzel S., Lehrbuch der Optik, Stuttgart (1928).
8. Slater J. C., Phys. Rev., 78, 748 (1950).
9. Schweinler H. C., Phys. Rev., 87, 5 (1952).
10. Tessman J. R., Phys. Rev., 83, 677 (1951).
11. Slater J. C., Frank V., Electromagnetism, New York, 1947.
12. Slater J. C., Symmetry and Energy Bands in Crystals, vol. 2, New York, 1965.
- 13*. Калашников С. Г., Электричество, 2-е изд., М., 1964.
- 14*. Тамм И. Е., Основы теории электричества, 1956.
- 15*. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Теория поля, 4-е изд., М., 1962.
- 16*. Смирнов В. И., Курс высшей математики, т. 3, 1965.
- 17*. Бете Г., Квантовая механика, изд-во «Мир», 1961.
- 18*. Бошит Г. Б., Введение в кристаллографию, М., 1954.

ТЕОРИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ ПО ДРУДЕ — ЛОРЕНЦУ

§ 1. Оптические свойства металла в модели свободных электронов

В гл. 1, § 1 и 2, рассматривались основные положения теории металлов Друде — Лорентца в применении к постоянному электрическому полю. Обратимся теперь к случаю переменного поля, подобно тому как это делалось в предыдущей главе для диэлектриков. Вклад свободных электронов можно отнести как к электропроводности, так и к диэлектрической проницаемости, причем каждая из этих величин становится комплексной. При рассмотрении оптических свойств более естественно относить вклад электронов к диэлектрической проницаемости. Заметим, что уравнение движения свободных электронов (1.1) совершенно аналогично уравнению движения для связанных электронов в диэлектрике, если в последнем положить возвращающую силу $-m\omega_0^2 x$ равной нулю. Следовательно, диэлектрическую проницаемость металла, содержащего N свободных электронов в единице объема, можно получить из выражения (4.11), полагая в нем $\omega_0 = 0$. Таким путем находим

$$\kappa_e = 1 + \frac{Ne^2/m\varepsilon_0}{-\omega^2 + i\omega g}. \quad (5.1)$$

Лорентцеву поправку, рассматривавшуюся в гл. 4, § 2, для свободных электронов вводить не нужно¹⁾). Вспомним, что смысл этой поправки состоял в учете разницы между средним полем и полем в точке, где находится диполь. Однако волновая функция свободного электрона почти равномерно распределена по элементарной ячейке, так что действующее на него поле очень близко к среднему. Следовательно, соотношение (5.1) давало бы правильное значение диэлектрической проницаемости, если бы не одно обстоятельство. Дело в том, что, кроме электронов проводимости, металл может содержать еще и связанные электроны, или диполи. Эту возможность мы примем во внимание позднее в § 4.

Вспомним, что вещественная и мнимая части показателя преломления $\sqrt{\kappa_e}$ определяют соответственно скорость

¹⁾ Этот вопрос обсуждается, например, в работе Дарвина [1].

распространения волны и ее затухание. Принято писать

$$\kappa_e = (n - ik)^2, \quad (5.2)$$

где n — показатель преломления, а k — константа, определяющая затухание [не путать с буквой k , используемой, например, в (4.27) в качестве значения волнового вектора; в настоящем параграфе мы будем использовать k только в смысле (5.2)]. Тогда, согласно (4.14), волна будет описываться функцией вида

$$E = E_0 \exp \left[i\omega \left(t - \frac{nx}{c} \right) \right] \exp \left(- \frac{\omega kx}{c} \right). \quad (5.3)$$

Константы n и k мы можем теперь найти, приравнявая κ_e из равенства (5.1) к величине $(n - ik)^2 = n^2 - k^2 - 2ink$. Получим

$$\begin{aligned} n^2 - k^2 &= 1 - \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega^2 + g^2}, \\ 2nk &= \frac{g}{\omega} \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega^2 + g^2}. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Обсудим структуру этих выражений. Заметим прежде всего, что по соображениям размерности, кроме самой частоты ω , являются еще две величины той же размерности: g и $\sqrt{Ne^2/m\epsilon_0}$. Последнюю величину будем обозначать через ω_P и вернемся к ней в следующем параграфе. Там будет показано, что она представляет собой так называемую плазменную частоту

$$\omega_P^2 = \frac{Ne^2}{m\epsilon_0}. \quad (5.5)$$

Равенство (1.3) позволяет ввести еще третью величину размерности частоты, а именно σ/ϵ_0 . Ее можно записать в виде

$$\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{Ne^2}{mg\epsilon_0} = \frac{\omega_P^2}{g}, \quad (5.6)$$

откуда явствует, что плазменная частота ω_P есть геометрическое среднее частот σ/ϵ_0 и g . Последняя величина представляет собой величину, обратную времени t_0 , которое, как мы знаем, тесно связано с временем свободного пробега.

Интересно подставить численные значения входящих сюда величин, характерные для реальных проводников, и посмотреть, каковы эти частоты. Возьмем электропроводность меди при комнатной температуре и предположим, что имеется один свободный электрон на атом. Тогда можем найти значения

σ/ϵ_0 и ω_p , после чего соотношение (5.6) позволит определить и g . Получаем следующие значения:

$$\begin{aligned} g &= 4,1 \cdot 10^{13} \text{ рад/сек}, \quad t_0 = 2,4 \cdot 10^{-14} \text{ сек}; \\ \omega_p &= 1,65 \cdot 10^{16}; \\ \frac{\sigma}{\epsilon_0} &= 6,6 \cdot 10^{18}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Видим прежде всего, что время t_0 , сравнимое с временем установления постоянного тока, представляет собой очень малую величину (что и утверждалось раньше). Этим угловым частотам соответствуют следующие длины волн: g отвечает длине волны, находящейся в инфракрасном диапазоне и равной приблизительно 46 мкм; ω_p соответствует длине волны, составляющей примерно 1,140 Å (ультрафиолетовая область); σ/ϵ_0 отвечает длине волны из рентгеновского диапазона. С последней частотой не связано никаких особенностей спектра; с другой стороны, как g , так и ω_p определяют некоторые характерные частоты в оптическом спектре металла.

Проанализируем соотношения (5.4) и рассмотрим поведение величин n и k при переходе от очень высоких частот к низким. Пусть частота ω очень велика по сравнению с ω_p (т. е. пусть мы находимся в рентгеновской части спектра). Тогда можно прежде всего пренебречь величиной g^2 по сравнению с ω^2 . Произведение $2nk$ близко к нулю, так что поглощение, определяемое величиной k , будет пренебрежимо мало. Первое из соотношений (5.4) в этом случае принимает вид

$$n^2 = 1 - \frac{N\epsilon^2/m\epsilon_0}{\omega^2} = 1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2. \quad (5.8)$$

Следовательно, если ω значительно превышает ω_p , то показатель преломления будет лишь ненамного меньше единицы. Позднее мы увидим, что для рентгеновского диапазона это утверждение остается в силе даже при учете действия поляризуемых диполей. Это явление, состоящее в том, что в области рентгеновского диапазона показатель преломления лишь слегка меньше единицы, хорошо установлено экспериментально.

По мере перехода к более низким частотам величина n^2 , как следует из (5.8), будет стремиться к нулю при приближении ω к ω_p . Как мы видели, для меди это происходит в далекой ультрафиолетовой области. Смысл обращения n в нуль можно понять из равенства (5.3). Перепишем его в виде

$$E = E_0 \exp \left[i \left(\omega t - \frac{2\pi x}{\lambda} \right) \right] \exp \left(- \frac{\omega k x}{c} \right). \quad (5.9)$$

Здесь λ — длина волны, равная $2\pi c/n\omega$. Когда n обращается в нуль, длина волны становится бесконечной, так что вся электронная структура кристалла осциллирует в фазе. Как будет показано в следующем параграфе, эта ситуация как раз и характерна для плазменных колебаний, откуда и появилось название частоты ω_p . Напомним, что при этой частоте постоянная затухания k все еще пренебрежимо мала вследствие малой величины g .

Следует отметить, что в этой ситуации нет никакого противоречия с теорией относительности, хотя читателю могло бы показаться обратное: стоит лишь вспомнить, что скорость распространения волн равна c/n и она обращается в бесконечность при стремлении n к нулю. Дело в том, что это фазовая скорость, а не групповая (с которой переносится энергия в поле излучения). С другой стороны, в соответствии с теорией относительности только групповая скорость не может превышать ¹⁾ c . В соответствии с известными законами распространения волн фазовая скорость равна $\lambda\omega/2\pi$, в то время как групповая скорость составляет

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial(2\pi/\lambda)}. \quad (5.10)$$

В рассматриваемом случае, когда $n = (2\pi/\lambda)(c/\omega)$, мы можем использовать для n формулу (5.8); тогда

$$\omega = \sqrt{\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^2 + \omega_p^2}, \quad (5.11)$$

и, следовательно,

$$v_g = c \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2} = nc. \quad (5.12)$$

Таким образом, групповая скорость не только не обращается в бесконечность, когда n стремится к нулю, но, напротив, сама обращается в нуль, и она меньше, чем c , во всем рассматриваемом нами интервале частот.

Когда частота становится меньше плазменной, что происходит, как мы видели для меди, в далекой ультрафиолетовой области, величина $1 - (\omega_p/\omega)^2$ становится отрицательной; при этом следует брать другое решение уравнений (5.4). Величиной g все еще можно пренебречь по сравнению с ω , так что

¹⁾ Точнее, согласно теории относительности, превышать c не может скорость распространения сигнала (часто она совпадает с групповой). Подробнее см. в работе [30]. — Прим. ред.

произведение $2nk$ можно считать близким к нулю, но теперь это должно иметь место при $n = 0$ и $k \neq 0$. В этом случае

$$k^2 = \left(\frac{\omega_P}{\omega}\right)^2 - 1. \quad (5.13)$$

Отсюда следует, что никакого распространения электромагнитной волны вообще не произойдет: она будет просто затухать все сильнее и сильнее по мере уменьшения частоты. Итак, мы получаем первый прямой результат: при частотах ниже плазменной электромагнитные волны должны сильно затухать, в то время как при более высоких частотах металл будет прозрачным. Как мы увидим позже, экспериментальные данные подтверждают это предсказание теории, хотя реальная ситуация и сложнее вследствие поляризации диполей (которой мы здесь пренебрегли).

Рассмотрим теперь, что происходит при переходе к еще более низким частотам, находящимся в инфракрасном и более низких микроволновом и радиочастотном диапазонах. Здесь частота ω будет мала по сравнению с g . Согласно первому из соотношений (5.4), $n^2 - k^2 = 1 - (\omega_P/g)^2$ есть постоянная величина, большая и отрицательная, поскольку ω_P значительно больше g (для меди). Следовательно, k будет гораздо больше n . Из второго соотношения (5.4) вытекает, что в этом случае $2nk = \omega_P^2/\omega g$, следовательно, произведение nk будет неограниченно возрастать при стремлении ω к нулю. Как мы только что видели, разность $n^2 - k^2$ стремится к постоянной величине. Поскольку эту разность можно записать в виде $(n - k)(n + k)$, мы видим, что если n и k увеличиваются при низких частотах, то разность $(n - k)$ должна уменьшаться по величине, т. е. коэффициенты n и k должны приближаться друг к другу. Следовательно, в этом предельном случае получаем

$$n = k = \sqrt{\frac{\omega_P^2}{2\omega g}} = \sqrt{\frac{\sigma}{2\epsilon_0\omega}}. \quad (5.14)$$

Здесь использовано соотношение (5.6). Другими словами, при достаточно низкой частоте оптическое поведение полностью определяется обычной низкочастотной электропроводностью.

Частотная зависимость указанного вида наблюдалась экспериментально Хагеном и Рубенсом [2] примерно в то же время, когда появилось теоретическое исследование Друде. Названные авторы измеряли коэффициент отражения металлического зеркала в инфракрасном свете и нашли, что по мере перехода ко все более низким частотам они приближаются к тем значениям,

которые получаются, если в формулах для коэффициента отражения использовать соотношения (5.14) [см., например, книгу ^[29] (гл. X, § 6)]. Это подтверждение предсказаний электромагнитной теории явилось в свое время веским аргументом в пользу правильности работы Друде. По современным представлениям, однако, данные Хагена и Рубенса менее убедительны в этом отношении, чем это казалось ранее.

Изучая поведение металлов при низких частотах, более естественно считать, что свободные электроны обуславливают электропроводность, а не поляризацию. Мы увидим, однако, что это просто два альтернативных метода рассмотрения одного и того же явления. Начнем, как и раньше, с уравнения (1.1); предположим, что $E = E_0 \exp(i\omega t)$ при $x = 0$, и подставим это выражение в уравнение (1.1). Тогда для скорости dx/dt имеем

$$\frac{dx}{dt} = - \frac{eE_0}{m(g + i\omega)} \exp(i\omega t). \quad (5.15)$$

Отсюда плотность тока $-Ne v = -Ne dx/dt$ связана с полем соотношением

$$\begin{aligned} \text{Плотность тока} &= \frac{Ne^2}{mg(1 + i\omega/g)} \times \text{Электрическое поле,} \\ \text{Электропроводность} &= \frac{Ne^2}{mg} \frac{1 - (i\omega/g)}{1 + (\omega/g)^2}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Иначе говоря, при низких частотах электропроводность стремится к величине Ne^2/mg , определяемой равенством (1.3). Однако она зависит от частоты по формуле (5.16) и имеет как действительную, так и мнимую части; последняя становится все более заметной по мере перехода к более высоким частотам. Работая в радиочастотном или микроволновом диапазонах, мы вправе пренебречь величиной ω/g и использовать значение электропроводности на постоянном токе.

Интересно исследовать величину затухания электромагнитной волны в области радиочастот. Согласно (5.9), напряженность поля в волне падает в e раз на расстоянии $c/\omega k$. Это расстояние обычно называется глубиной скин-слоя и обозначается через δ . Пользуясь формулой (5.14), получаем

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\omega \sigma \mu_0}}. \quad (5.17)$$

Здесь использовано также соотношение (4.16) для исключения скорости света в пустоте c . Равенство (5.17) представляет собой стандартный результат электромагнитной теории для диапазона частот, обычно используемых на практике. Мы уже сталкивались с ним в гл. 3 [см. формулу (3.62)].

По мере перехода к очень низким температурам электропроводность металла сильно возрастает по причинам, которые обсуждались в предыдущих главах. Плазменная частота, зависящая только от N , остается неизменной, но увеличение электропроводности происходит вследствие увеличения времени свободного пробега t_0 , или уменьшения g . В результате величина g может перейти из инфракрасной области (соответствующей комнатной температуре) в микроволновую. При этом для микроволновых частот уже нельзя будет пользоваться значением электропроводности на постоянном токе, а придется учитывать отклонения, вносимые частотной зависимостью (5.16). В то же время, однако, возникают и другие осложнения, сильно изменяющие всю ситуацию: вместе со временем t_0 сильно возрастает и средняя длина свободного пробега электронов. В результате мы попадаем в область, где средняя длина свободного пробега велика по сравнению с глубиной скин-слоя. В этом случае уже нельзя рассматривать электропроводность внутри скин-слоя, как это делалось в гл. 1, § 2, но необходимо учитывать тот факт, что электроны, находящиеся глубже скин-слоя, там, где поле очень мало, могут проникнуть в скин-слой до того, как они испытают соударение. Явление, которое при этом возникает, известно под названием аномального скин-эффекта; в последние годы оно подвергалось интенсивному исследованию¹⁾.

§ 2. Плазменные колебания

Соотношением (5.5) мы ввели плазменную частоту ω_p , которая появляется в теории оптических свойств металлов и которая, в частности, определяет точку спектра, составляющую границу между областью прозрачности металла при более высоких частотах и областью его непрозрачности при более низких частотах. Попытаемся выяснить, каков смысл этой частоты. Он не был понят во времена Друде, хотя в дальнейших работах, в которых значение частоты ω_p было выяснено, не использовалось никаких новых идей сверх имевшихся уже во времена Друде.

Представление о плазме было введено в физику Ленгмюром, применившим этот термин к газовому разряду, в котором имеются свободные положительные ионы и свободные электроны как раз в таком количестве, что вся среда в среднем оказывается нейтральной. Ленгмюр получил ясные экспе-

¹⁾ См., например, [3]. Ссылки на другие статьи в библиографии в конце этого тома, имеющие отношение к этому вопросу, см. в конце главы. Пилпард [3] показал, что это явление можно использовать для получения ценной информации относительно поверхности Ферми в металлах.

риментальные доказательства возникновения мощных электромагнитных колебаний в таком разряде. Эти колебания оказывали ускоряющее или тормозящее действие на электроны, попавшие в плазму, так что эти электроны очень быстро приходили в тепловое равновесие с максвелловским распределением скоростей, соответствующим очень высокой температуре. Происхождение этих колебаний удалось объяснить довольно просто. Это было сделано в статье Тонкса и Ленгмюра в 1929 г. [4].

Тонкс и Ленгмюр привели два рассуждения, дающие объяснение плазменным колебаниям. Оба они интересны. Первое рассуждение относится к одномерной задаче, в которой колебания электронов происходят в направлении оси x и электрическое поле также изменяется вдоль этого направления. Пусть смещение электрона в направлении x характеризуется функцией $\xi(x, t)$ (в разных точках смещения могут быть различными). Поляризация, производимая смещением электронов, равна $P = -Ne\xi$, где, как обычно, N — число электронов в единице объема. Поскольку плотность заряда есть $-\operatorname{div} P$, имеем

$$\rho = Ne \frac{\partial \xi}{\partial x}. \quad (5.18)$$

Но, согласно одному из уравнений Максвелла, $\operatorname{div} D = \rho$. В пренебрежении всякой другой поляризацией это дает $\epsilon_0 \operatorname{div} E = \rho$. Так как вектор E по условию направлен вдоль оси x , то

$$\epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial x} = Ne \frac{\partial \xi}{\partial x}. \quad (5.19)$$

Интегрируя, получаем

$$E_x = \frac{Ne}{\epsilon_0} \xi. \quad (5.20)$$

Поскольку сила, действующая на электрон, равна $-eE$, имеем

$$\text{Сила} = -\frac{Ne^2}{\epsilon_0} \xi. \quad (5.21)$$

Таким образом, мы получили возвращающую силу, пропорциональную смещению. Положив ее, согласно второму закону Ньютона, равной $m\partial^2\xi/\partial t^2$, получим простое гармоническое колебание с угловой частотой ω_0 , равной плазменной частоте.

Второе рассуждение Тонкса и Ленгмюра носит более общий характер, поскольку не содержит предположения о направлении смещения. При этом используется уравнение Максвелла $\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J} + \partial \mathbf{D}/\partial t$, которое нужно скомбинировать с формулой для плотности тока $\mathbf{J} = -Ne\mathbf{v}$, где \mathbf{v} — скорость электрона. Если

подставить сюда $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$ и взять производную по времени от первого уравнения, то получим

$$\operatorname{rot} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -Ne \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (5.22)$$

Согласно уравнению Максвелла, $\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t = -\mu_0 \partial \mathbf{H} / \partial t$; следовательно,

$$\operatorname{rot} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}. \quad (5.23)$$

В случае потенциального электрического поля $\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0$, что и предположили Тонкс и Ленгмюр. При этом левая часть уравнения (5.22) равна нулю, и, пользуясь вторым законом Ньютона в виде $m d\mathbf{v} / dt = -e \mathbf{E}$, получаем уравнение

$$\epsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{Ne^2}{m} \mathbf{E} = 0. \quad (5.24)$$

Отсюда вновь вытекает, что вектор \mathbf{E} должен испытывать гармонические колебания с плазменной частотой.

Согласно любому из этих двух рассуждений, плазменные колебания относятся к необычному типу. Из первого рассмотрения мы видели, что смещение электронов может происходить вдоль электрического поля. Если смещение зависит от x , как это предполагалось при выводе, то мы можем получить эквивалент продольной электромагнитной волны. Можно, например, считать, что величина ξ синусоидально зависит как от координаты x , так и от времени. Это формально даст нам волну вида $\exp[i(\omega t - 2\pi x / \lambda)]$, где λ — константа, характеризующая движение волны вдоль направления x , причем как напряженность электрического поля, так и смещение частиц также направлены вдоль оси x . Данный случай — один из немногих, когда мы встречаемся с продольной электромагнитной волной (которая, конечно, не может существовать в пустоте). Волна обладает, однако, той особенностью, что угловая частота ω не зависит от предполагаемой величины λ . Напротив, если рассматривать частоту ω как функцию $2\pi / \lambda$, то окажется, что фактически она не зависит от $2\pi / \lambda$, так что в соответствии с (5.10) групповая скорость равна нулю. Это подтверждает наше первоначальное утверждение о равенстве нулю групповой скорости для плазменной частоты. Видно, однако, что при этой частоте может иметь место и более сложная координатная зависимость поля, чем это предполагалось в рассуждениях предыдущего параграфа. Фактически из уравнения (5.24) следует, что мы можем получить

волну любой формы и все же ей будет отвечать одна и та же угловая частота ω_p ¹⁾.

До конца книги мы столкнемся и с другими примерами продольных электромагнитных волн: среди колебаний кристалла существуют колебания так называемой продольной оптической моды, которая также обладает этим свойством (см. гл. 8, § 3). Во всех таких случаях существует простое требование, которое должно быть выполнено, чтобы колебания были возможны: диэлектрическая проницаемость должна обращаться в нуль. Это легко понять. Возьмем уравнение Максвелла $\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho$ и предположим, что в нашем случае плотность заряда обусловлена только поляризацией, так что $\rho = 0$. Если вектор \mathbf{E} имеет компоненту вдоль направления распространения, то ясно, что $\operatorname{div} \mathbf{E}$ не может равняться нулю. Следовательно, единственная возможность удовлетворить уравнению $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$ состоит в том, чтобы равнялась нулю диэлектрическая проницаемость. Как раз этим условием и определяется плазменная частота в выражении (5.8).

§ 3. Дальнейшее развитие теории плазменных колебаний

С того времени, о котором мы писали, общее представление о плазменных колебаниях и об их связи со свойствами металлов получило очень интересное развитие. В настоящем параграфе мы проследим его историю. Не сразу было понято, что существует связь между плазменными колебаниями Тонкса и Ленгмюра и оптическими свойствами металлов. Плазменные колебания сами по себе привлекали внимание исследователей, занимавшихся распространением радиоволн в ионосфере. Действительно, последняя представляет собой разновидность плазмы с очень малым числом электронов в единице объема, так что плазменная частота попадает в важный радиочастотный диапазон. Имела место серьезная дискуссия по поводу того, следует ли использовать в задаче о плазменных колебаниях поправку Лорентца. В дискуссии участвовали Хартри [5, 6], Тонкс [7], Нортон [8] и Дарвин [1, 9], которому принадлежало последнее слово. В его статье был сделан вывод о ненужности названной поправки²⁾.

Как раз в то время, когда происходила эта дискуссия, было открыто совершенно новое направление исследований. Его на-

¹⁾ Ситуация несколько меняется при учете пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости, т. е. при учете ее зависимости не только от частоты, но и от волнового вектора. См., например, [31]. — *Прим. ред.*

²⁾ В последующие годы вопрос о действующем поле в плазме, обсуждался неоднократно. См. сводку результатов в книге [31]. — *Прим. ред.*

чало положено наблюдениями Вуда [10, 11], показавшего, что щелочные металлы становятся прозрачными в ультрафиолетовой области, когда длина волны делается меньше некоторого критического значения. Последнее неуклонно уменьшается по мере перехода от цезия к литию. Первая попытка объяснения принадлежит Кронигу [12], который пытался связать это явление не со свободными электронами, а со связанными электронами в металле, о которых мы будем говорить в следующем параграфе. Это объяснение, однако, было не вполне удовлетворительным, и несколько позже Зинер [13] предположил, что явление, наблюдавшееся Вудом, определяло порог прозрачности при переходе к частотам выше плазменной. Зинер вычислил плазменные частоты для щелочных металлов и нашел хорошее согласие с данными Вуда.

Следующий шаг был сделан только после второй мировой войны, причем в отличие от ранних исследований он существенным образом включал в себя квантовый подход. Этот шаг состоял в квантовании плазменных колебаний и в возбуждении их электронами, проходящими через металл. Главным толчком к этому шагу послужила серия замечательных опытов Рутемана [14, 15] и Ланга [16] по определению потерь энергии электронами, проходящими через металлические пленки. Эти опыты, начатые в начале войны и завершенные после нее, показали, что, проходя через тонкую металлическую фольгу, электроны (энергия которых точно измерялась) теряли дискретные количества энергии, составляющие по порядку величины десятки электронвольт. Опыты такого рода не новы. Аналогичные наблюдения были выполнены около 1930 г. Рудбергом, который совместно с автором этой книги [17] предположил, что потери энергии могли соответствовать энергиям возбуждения электронов металла из одной энергетической зоны в другую. Вероятно, такие переходы иногда действительно происходят; в частности, они могли иметь место и в опытах Рудберга. Однако Рутеман и Ланг обнаружили несколько случаев, один из которых относится к алюминию, где проявлялся поразительный эффект, никогда ранее не наблюдавшийся: потери были кратны (со множителями 1, 2, 3, 4) некоторому фундаментальному значению.

К тому времени существовала уже хорошо развитая теория потерь энергии электронами, проходящими через металл. Стандартную теорию энергетических потерь при прохождении частиц через диэлектрики, принадлежавшую Бору, нельзя было легко перенести на металлы. Попытки сделать это показали, что, согласно названной теории, электрон в металле должен был бы терять энергию бесконечно быстро, что было безусловно

неверно. Крониг и Корринга [18], а несколько позже Крамерс [19] рассматривали эту задачу, предполагая, что электроны возбуждают в металле плазменные колебания. Их трактовка, однако, была чисто классической, без учета возможности квантования плазменных колебаний.

Примерно в то же время вспыхнул общий интерес к теории плазменных колебаний. Бом и Гросс [20] в 1949 г. дали гораздо более утонченную трактовку этих колебаний, чем это делалось до войны, а Бом и Пайнс¹⁾ развили для этой цели весьма детальную теорию. В этой теории плазменные колебания квантовались по правилам квантовой механики, так что естественно было предположить, что электрон, проходящий через плазму, может отдавать плазменным колебаниям кванты энергии. Пайнс назвал такой дискретный квант плазменной энергии плазмоном. После этого очень существенной была попытка идентифицировать энергетические потери, найденные Рутеманом и Лангом, а позднее и многими другими авторами, с энергиями возбуждения плазмонов. Во многих случаях это оказалось действительно возможным²⁾. В других случаях, когда этого не удается сделать, вполне может иметь место и тот тип возбуждения, который обсуждался Рудбергом и Слэтером.

Фрелих [23–25]³⁾ в нескольких статьях дал феноменологическую теорию возбуждения плазменных колебаний электронами, проходящими через твердое тело, в частности через металл. Он разложил электрическое поле движущегося электрона в интеграл Фурье (т. е. по плоским волнам) и рассмотрел энергетические потери электрона классическим путем (как энергию, передаваемую плазменным волнам), расширив тем самым более ранние результаты Крамерса [19]. Затем он вычислил вероятность возбуждения плазмона, полагая скорость потери энергии электроном в металле равной в среднем энергии, возникающей в виде плазмонов. Эта вероятность оказалась пропорциональной мнимой части обратной диэлектрической проницаемости. Имено, пусть

$$\kappa_e = \kappa_1 + i\kappa_2, \quad (5.25)$$

¹⁾ См. статьи Д. Бомы [1279] и Д. Пайнса [3930] с соотр. в библиографии в конце книги и в списке, приведенном в конце гл. 11 (к § 7), за годы с 1950 по настоящее время.

²⁾ Существует несколько обзорных статей по этому вопросу. Старые экспериментальные работы можно найти в статье Мартона [21], а теоретические работы — у Пайнса [22]. Как примеры современных экспериментальных работ см. в библиографии статьи Робинса [4118] и Беста [1210, 1211] и обзорную статью Клемпера и Шеферда [2946].

³⁾ См. также [20]; относительно экспериментальных результатов, более поздних, чем перечисленные выше, см. в статье [27].

тогда

$$\frac{1}{\kappa_e} = \frac{\kappa_1 - i\kappa_2}{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}, \quad (5.26)$$

и скорость потери энергии пропорциональна

$$\frac{\kappa_2}{\kappa_1^2 + \kappa_2^2}, \quad (5.27)$$

К этой формуле мы вернемся позднее, в § 4 этой главы. В случае когда диэлектрическая проницаемость «почти вещественна», т. е. мнимая часть ее очень мала, функция (5.27) будет иметь чрезвычайно высокий максимум в той точке, где вещественная часть κ_1 обращается в нуль. Этим подтверждается простой результат, отмеченный нами раньше: плазменные колебания отвечают точке, в которой диэлектрическая проницаемость обращается в нуль.

Тип возбуждения, к которому относятся плазменные колебания, представляет собой ярко выраженный коллективный эффект: все электроны в кристалле в каком-то смысле осциллируют вместе. Следовательно, такие эффекты вообще нельзя объяснить в рамках одноэлектронной теории. Этот факт привел к общей дискуссии о связи между плазменными колебаниями и правильным способом описания электронных взаимодействий в кристалле¹⁾. В гл. 11, § 6, мы обратимся к этой стороне вопроса и покажем, как Бом, Пайнс и их сотрудники, обобщая теорию плазменных колебаний, смогли изучить многие следствия межэлектронной корреляции. Методы, использованные ими, очень трудно изложить на привычном языке конфигурационного взаимодействия. Итак, эта линия развития, начиная с очень простой электронной теории металлов Друде и Лорентца, непосредственно привела к одному из самых сложных разделов современной теории твердого тела. Однако, прежде чем обращаться к этим проблемам, мы должны ознакомиться с многими разделами теории металлов, которые до сих пор не были нами затронуты.

Представление о плазменных колебаниях развивалось еще в одном направлении — в связи с теми задачами, с которых началось их исследование. Речь идет о физике газового разряда. Современные интересы распространились от обычных разрядов и от проблем физики ионосферы к газам в таких экстремальных по температуре и давлению условиях, какие встречаются в атмосферах звезд, в магнитной гидродинамике, в проблемах

¹⁾ Впервые корректная многоэлектронная трактовка плазменных колебаний в рамках классического подхода была дана А. А. Власовым [32] и Л. Д. Ландау [33]. — *Прим. ред.*

ядерного синтеза. Во всех этих случаях приходится сталкиваться с проблемами физики плазмы, причем в большинстве случаев при наличии внешнего магнитного поля. Таким образом, здесь приходится иметь дело с комбинацией явлений, о которых говорилось в настоящей главе, и явлений, рассмотренных в гл. 3. Это привело к интенсивному развитию теории, касаться которого в этой книге мы больше не можем. Читатель, однако, может найти некоторые работы в этой области по списку, приведенному в гл. 11, § 7, и по библиографии в конце книги. Тесная связь между теорией твердого тела, квантовой механикой многих тел и магнитной гидродинамикой, которую мы обнаруживаем при изучении этих явлений, по-видимому, приведет в будущем к значительному развитию теории.

§ 4. Связанные электроны в металлах

До сих пор, рассматривая металлы, мы исходили из соотношения (5.1), т. е. предполагали присутствие одних лишь свободных электронов. Однако нет никаких причин предполагать, что металлы не имеют также и связанных электронов — таких же, как в диэлектриках. Они дадут дополнительный вклад в диэлектрическую проницаемость [см. формулу (4.12)], так что можно ожидать, что полная диэлектрическая проницаемость будет иметь вид

$$\kappa_e = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{-\omega^2 + i\omega g} + \sum_k \frac{N_k e^2/m\epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k}. \quad (5.28)$$

Такие формулы были использованы Друде и Лорентцем, и существуют четкие экспериментальные доказательства присутствия членов, обусловленных связанными электронами. Эти доказательства были получены при тщательном исследовании частотной зависимости величин n и k [см. соотношение (5.2)], экспериментально определяемой по отражению от металлов. Опыты такого рода были выполнены в начале нашего века, и на этом раннем этапе многое было сделано по их интерпретации в соответствии с формулой (5.28). Изменения коэффициента отражения с длиной волны в видимой части спектра, которые объясняют цвет таких металлов, как медь и золото, обусловлены именно дополнительными слагаемыми диэлектрической проницаемости. В последнее время вновь оживился интерес к этим проблемам, и справедливость формулы (5.22) вновь была подтверждена экспериментально. Хорошее описание экспериментальной стороны вопроса дано в работе Шульца [28]¹⁾.

¹⁾ См. также более поздние экспериментальные работы Эренрайха, Филлипа и др. в библиографии в конце книги.

В связи с формулой (5.28) следует сделать несколько замечаний. Прежде всего она не содержит поправки Лорентца. Как уже отмечалось, в случае свободных электронов последнюю вводить не следует, но это вовсе не означает, что она не верна для связанных электронов в металле. Осцилляторы, соответствующие этим электронам, по-видимому, локализованы на атомах, а не распределены равномерно по всему кристаллу, как свободные электроны. Можно ожидать поэтому, что для них лорентцева поправка верна. На языке зонной теории, к которой мы сейчас перейдем, волновые функции в этом случае имеют вид блоховских сумм для довольно сильно связанных электронов: они весьма близко сконцентрированы около ядер.

Для согласования формулы (5.28), с одной стороны, и необходимости учета поправки Лорентца, с другой, мы используем соображения; уже упомянутые при обсуждении формулы (4.51). Там было показано, что поправку Лорентца можно ввести путем изменения собственной частоты колебаний связанного электрона. Мы сослались на результат Фёрстерлинга, согласно которому то же самое можно проделать и для случая многих собственных частот. Доказательство Фёрстерлинга основано на введении системы уравнений типа (4.51), по одному на каждую собственную частоту колебаний. Их совместное решение приводит к секулярному уравнению, корни которого дают модифицированные резонансные частоты. Фёрстерлинг проводит расчет только для простейшего случая, когда можно пренебречь затуханием. Для этого случая мы дадим более простое рассуждение, чем предложенное Фёрстерлингом. Оно будет основано только на свойствах аналитических функций.

Разрешая уравнение (4.21) относительно диэлектрической проницаемости, получаем

$$\kappa_e = \frac{1 + 2/3 \sum_k \frac{N_k e^2 / m \epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2}}{1 - 1/3 \sum_k \frac{N_k e^2 / m \epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2}}. \quad (5.29)$$

Здесь мы пренебрегли затуханием. Рассмотрим теперь выражение (5.29), как функцию от аргумента ω^2 . Она обращается в бесконечность только для тех частот, для которых обращается в нуль знаменатель в (5.29). С другой стороны, при обращении в бесконечность суммы по k правая часть (5.29) остается конечной (при этом она равна -2). Для каждой частоты, для которой знаменатель обращается в нуль, т. е. имеет место равенство

$$\sum_k \frac{N_k e^2 / m \epsilon_0}{\omega_k^2 - \omega^2} = 3, \quad (5.30)$$

функция κ_e будет иметь простой полюс. Поэтому, согласно общим принципам теории функций, мы можем представить κ_e в виде суммы членов вида $\text{const}/(\omega_k'^2 - \omega^2)$, где ω_k' — один из корней уравнения (5.30). Эти функции имеют ту же природу, что и в формуле Зельмейера (4.12), если в последней пренебречь затуханием. К приближенному виду (4.12) можно прийти и с учетом затухания. Следует лишь выполнить разложение общего равенства, подобного (5.29), но содержащего затухание, имея в виду что полюсы в этом случае отвечают комплексным частотам (что и приводит к появлению в формуле Зельмейера членов, описывающих затухание). Иначе говоря, с точки зрения теории функций функция Зельмейера имеет весьма общий смысл, так что нет необходимости записывать вклады связанных электронов в лорентцевой форме (4.21). Следует помнить, однако, что если мы пользуемся формулой (4.12), то резонансные частоты ω_n будут отличны от тех, которые получились бы из (4.21).

Итак, мы видим, что представление диэлектрической проницаемости в виде (5.28) вполне законно даже в случае, когда для связанных электронов вводится поправка Лорентца. Необходимо лишь правильно выбрать величины ω_n и g_n . Наши общие рассуждения, однако, содержат меньше информации, чем доказательство Фёрстерлинга, коль скоро речь идет о механизме модификации резонансных частот. Как показано в цитированной работе, на самом деле мы имеем связанную систему, где каждая резонансная частота взаимодействует с остальными, что и приводит к модификации частот системы.

Второй существенный момент, заслуживающий обсуждения, касается связи формулы (5.28) с более современными теориями металлического состояния. Очевидно, могут иметь место электронные переходы из одной энергетической зоны в другую. В принципе они не будут отличаться от одноэлектронных переходов в атоме и, как и в атомном случае, их можно описать дисперсионной формулой Крамерса — Гейзенберга. Это непосредственно приводит к появлению в (5.28) членов того же типа, что и для связанных электронов. Вместо величин N_n теперь появятся силы осцилляторов, как это и было в случае (4.48), (4.49). Для вычисления их и связанных с ними величин, например матричных элементов дипольного момента, нужно рассмотреть вероятности переходов между блоховскими функциями. Этого мы в настоящей книге делать не будем. Однако уже из сказанного выше ясно, что экспериментальное определение соответствующих слагаемых в формуле (5.28) позволит получить некоторые сведения об энергетических зонах. По

этой причине изучение оптических свойств металлов стало в последнее время чрезвычайно популярным после долгого периода относительного забвения. Такие работы, как статьи Эренрайха, Филиппа и их сотрудников, приведенные в библиографии и перечисленные в конце данной главы, показывают, сколь ценные сведения удается теперь получать, изучая оптические свойства кристаллов. В гл. 3, § 10, это уже обсуждалось на примере меди. Такие исследования, в центре внимания которых находится зонный аспект проблемы, т. е. рассматриваются связанные, а не свободные электроны, проводятся на диэлектриках и на полупроводниках так же, как и на металлах. Однако в случае диэлектриков члены, обусловленные свободными электронами, в формуле (5.28) отсутствуют, а для полупроводников, где электронов проводимости мало, они менее существенны, чем для металлов. При этом вследствие малой величины N плазменная частота расположена в инфракрасной, а не в ультрафиолетовой области спектра¹⁾.

Третий момент, относящийся к формуле (5.28), касается плазменной частоты. Как мы видели, она соответствует обращению диэлектрической проницаемости в нуль. Мы найдем ее, положив выражение в правой части (5.28) равным нулю и решая получающееся уравнение относительно ω . В работах по плазме на это уравнение обычно ссылаются как на дисперсионное уравнение плазмы. Очевидно, что члены, обусловленные связанными электронами, будут модифицировать плазменную частоту. Если она лежит в ультрафиолетовой части спектра, то величиной g в этом диапазоне частот, как мы видели, можно пренебречь, и если мы находимся далеко от всех собственных резонансных частот для связанных электронов, то можно пренебречь и всеми величинами g_k . Тогда дисперсионное уравнение примет вид

$$1 = \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_p^2} + \sum_k \frac{N_k e^2/m\epsilon_0}{\omega_p^2 - \omega_k^2}. \quad (5.31)$$

Если считать, что в первом приближении плазменная частота определяется ее значением для свободных электронов $\omega_p^2 = Ne^2/m\epsilon_0$, то второй член в уравнении (5.31) можно рассматривать как возмущение. Сумму по k при этом можно разбить на две части: члены, для которых ω_k меньше плазменной частоты

¹⁾ Речь идет о плазменной частоте, обусловленной свободными носителями заряда. Помимо нее, могут наблюдаться и плазменные частоты, описывающие колебания всех валентных электронов. В этом отношении полупроводники (например, кремний) ведут себя подобно металлам. — *Прим. ред.*

(т. е. для которых резонанс находится в видимой или инфракрасной области спектра), и члены, для которых ω_k больше ω_p (т. е. резонанс лежит в рентгеновской области спектра). Члены первого типа будут положительны и приведут к увеличению плазменной частоты. Следовательно, если для некоторого члена частота ω_k мала по сравнению с ω_p , мы просто прибавим соответствующую этому члену величину $N_k e^2 / m \epsilon_0$ к члену $N e^2 / m \epsilon_0$, обусловленному свободными электронами. Иначе говоря, члены такого типа приводят к эффективному увеличению числа свободных электронов и соответственно увеличению плазменной частоты ω_p . С другой стороны, если частота ω_k велика по сравнению с ω_p , то соответствующее слагаемое в уравнении (5.31) будет отрицательным и обусловит уменьшение плазменной частоты. Пайнс [22] исследовал фактическое влияние этих членов на плазменные частоты металлов. Для щелочных металлов все резонансы обусловлены электронами внутренних оболочек, для которых резонансные частоты гораздо больше плазменной. Поэтому, хотя последние члены в уравнении (5.31) и отрицательны для этих элементов, вклад их очень мал, и простая формула теории свободных электронов остается почти правильной. Учет этих членов для щелочных металлов улучшает согласие между вычисленными и наблюдаемыми плазменными частотами.

Однако для переходных элементов и таких элементов, как медь, серебро и золото, имеются существенные резонансы в видимой и ультрафиолетовой областях спектра. Мы уже указывали на их роль в окраске названных веществ, иллюстрируя это на примере меди (см. фиг. 3.6). По-видимому, эти резонансы обусловлены переходами из d -оболочек (соответственно $3d$, $4d$, $5d$) на незаполненные уровни, лежащие выше уровня Ферми. Такие переходы соответствуют относительно небольшим разностям энергии. В согласии со сказанным выше, для таких элементов плазменная частота должна возрасти по сравнению со случаем свободных электронов. Этот эффект был обнаружен экспериментально. В расчетных данных (5.7) мы использовали медь в качестве примера и получили для нее плазменную частоту, соответствующую длине волны примерно $1,140 \text{ \AA}$ и энергии порядка $10,9 \text{ эв}$. В действительности наблюдаемые энергетические потери для электронов, проходящих через медь, имеют пик для почти вдвое больших энергий, что указывает на увеличение плазменной частоты в этом случае примерно вдвое вследствие наличия членов, обусловленных связанными электронами. Соответствующая длина волны попадает так далеко за границы обычной ультрафиолетовой области спектра (а именно в район $500\text{--}600 \text{ \AA}$), что прозрачность меди в области частот выше данной еще не наблюдалась. Ситуация для меди обсуждалась в

работах Вильсона [26], Эренрайха и Филиппа [1934], показавших, что функция (5.27) имеет максимумы, совпадающие с наблюдаемыми в энергетических потерях.

Мы сделаем еще только одно дополнительное замечание относительно формулы (5.28). Рассмотрим рентгеновские длины волн, когда частота ω велика по сравнению со всеми резонансными частотами кристалла (это возможно, если мы имеем дело с жесткими рентгеновскими лучами и легкими элементами). Тогда в формуле (5.28) можно пренебречь величинами ω_k^2 по сравнению с ω^2 , и мы получим

$$\kappa_e = 1 - \frac{\left(N + \sum_k N_k\right) e^2 / m \epsilon_0}{\omega^2}. \quad (5.32)$$

Иначе говоря, в этом предельном случае все электроны, свободные и связанные, влияют на дисперсию одинаково. Это соотношение представляет предельный случай формулы рассеяния Томсона. Однако, как только частота подойдет к краю K -поглощения для самого тяжелого элемента в кристалле, мы получим первый резонанс и столкнемся с явлениями поглощения и аномальной дисперсии, характерными для рентгеновской спектроскопии. Подобная ситуация будет иметь место для каждого края поглощения, соответствующего каждому типу связанных электронов в атомах кристалла. Картина здесь не так проста, как могло бы показаться на первый взгляд, поскольку электрон может перейти в одну из возбужденных энергетических зон кристалла. Это означает, что мы будем иметь непрерывный спектр поглощения и наблюдать поглощение на всех частотах, лежащих выше его края. (Это поглощение быстро убывает по интенсивности при переходе к более высоким частотам). Явления поглощения и связанной с ним аномальной дисперсии стали объектом многих исследований в области рентгеновской спектроскопии. Мы отложим их рассмотрение до следующего тома.

§ 5. Библиография по оптическим свойствам кристаллов

В этой и предыдущей главах мы упоминали о том, что в кристаллах возможны оптические электронные переходы из одной энергетической зоны в другую. В простых случаях, какие представляют полупроводники, край поглощения может дать непосредственную информацию относительно ширины запрещенной зоны. В металлах можно наблюдать поглощение из внутренних зон на уровни, лежащие выше уровня Ферми, что позволяет установить относительное расположение этих зон, как указыва-

лось в гл. 3, § 10, для меди. В настоящем томе мы не будем вдаваться в детали этих проблем. Они осложняются образованием экситонов, которого мы кратко коснемся в приложении 2, отложив основную дискуссию до следующего тома. Однако, учитывая тесную связь между оптическими измерениями и другими типами экспериментов по изучению энергетических зон, мы перечислим статьи, касающиеся этого общего вопроса, в библиографии данного тома. Статьи, относящиеся к оптическим свойствам конкретных веществ, перечислены в ссылках на библиографию в гл. 3, § 11. Статьи по оптическим свойствам кристаллов, носящие более общий характер, не связанные с конкретными кристаллами, содержатся в библиографии, ссылки на которую указаны в конце данной главы.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Darwin C. G., Proc. Roy. Soc., **A146**, 17 (1934).
2. Hagen E., Rubens H., Ann. d. Phys., **11**, 873 (1903).
3. Pippard A. B., Proc. Roy. Soc., **A191**, 370, 385, 399 (1947).
4. Tonks L., Langmuir I., Phys. Rev., **33**, 195 (1929).
5. Hartree D. R., Proc. Camb. Phil. Soc., **25**, 97 (1929); **27**, 143 (1932).
6. Hartree D. R., Nature, **132**, 929 (1933).
7. Tonks L., Nature, **132**, 101, 710 (1933).
8. Norton K. A., Nature, **132**, 676 (1933).
9. Darwin C. G., Nature, **133**, 62 (1934).
10. Wood R. W., Phys. Rev., **44**, 353 (1933).
11. Wood R. W., Lukens C., Phys. Rev., **54**, 332 (1938).
12. Kronig R. de L., Nature, **132**, 601 (1933).
13. Zener C., Nature, **132**, 968 (1933).
14. Ruthemann G., Naturwiss., **29**, 648 (1941).
15. Ruthemann G., Ann. d. Phys., **2**, 113 (1948).
16. Lang W., Optik, **3**, 233 (1948).
17. Rudberg E., Slater J. C., Phys. Rev., **50**, 150 (1936).
18. Kronig R. de L., Korryng J., Physica, **10**, 406, 800 (1943).
19. Kramers H. A., Physica, **13**, 401 (1947).
20. Bohm D., Gross E. P., Phys. Rev., **75**, 1851, 1864 (1949).
21. Martin L., Rev. Mod. Phys., **28**, 172 (1956).
22. Pines D., Rev. Mod. Phys., **28**, 184 (1956).
23. Fröhlich H., Platzman R. L., Phys. Rev., **92**, 1152 (1953).
24. Fröhlich H., Pelzer H., Proc. Roy. Soc., **A68**, 525 (1955).
25. «Max Planck Festschrift», Berlin, 1958, S. 277.
26. Wilson C. B., Proc. Phys. Soc., **76**, 481 (1960).
27. Powell C. J., Proc. Phys. Soc., **76**, 593 (1960).
28. Schulz L. G., Adv. Phys., **6**, 102 (1957).
29. Slater J. C., Franck N. H., Electromagnetism, New York, 1947.
- 30*. Зоммерфельд А., Оптика, ИЛ, 1953.
- 31*. Гинзбург В. Л., Распространение электромагнитных волн в плазме, 2-е изд., М., 1965.
- 32*. Власов А. А., ЖЭТФ, **8**(3), 291 (1938); УФН, **93**, вып. 3, 444 (1967).
- 33*. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, **16**, 574 (1946); УФН, **93**, вып. 3, 527 (1967).

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

к § 1

Аномальный скин-эффект: [990, 1041, 1046—1048, 1050, 1056, 1158, 1529, 1532, 1623, 1799, 1802, 1803, 2208, 2345, 2749, 2751, 3533, 3534, 3938, 3939, 3940, 3942, 4087, 4088, 4289, 4315, 4375, 4408, 4850, 4851].

к § 2

Оптические свойства кристаллов: [926, 934, 991, 999, 1032, 149, 1185, 1189, 1295, 1315, 1319, 1426, 1431, 1433, 1434, 1447, 1448, 1449, 1485, 1502, 1503, 1506, 1545, 1550, 1551, 269, 270, 1629, 1640, 280, 1733, 1779, 1781—1783, 1801—1803, 1806, 304, 305, 1835, 1867, 312, 1902, 1903, 1936, 1937, 1946, 1948, 2008, 2013, 2032, 2059, 2068, 2075, 2078, 2092, 2127, 407, 424, 2230, 2289, 2359, 2379, 2405, 2410, 2438, 2441, 2447, 2448, 2610, 2657, 2658, 2826, 2835, 2840, 3035, 3045, 571, 3102, 3216, 3263, 3308, 3388, 3490, 3544, 3547, 3559, 3646, 678, 687, 3691, 3695, 3697, 3719, 3822, 3823, 733, 3883, 3885, 3896—3899, 4009, 740—743, 4043, 4062, 4110—4112, 749, 4148, 4149, 4166, 4211, 4212, 4221, 4235, 4274, 4316, 4319, 782, 4368, 4369, 4399, 4400, 4413, 4440, 4484, 4485, 4498, 4522—4524, 4533, 4543, 4573, 4577, 4579, 4605, 4638, 4642, 4690, 4725, 4726, 4742, 817, 4764, 872, 4832—4836, 877, 884, 885, 890].

Глава 6

ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

§ 1. Элементарная теория рассеяния

В 1912 г. физика твердого тела получила заметный толчок в развитии благодаря открытию дифракции рентгеновских лучей Фридрихом, Книппингом и Лауэ [1-3] и быстрому изучению этого явления У. Г. Брэггом и его сыном У. Л. Брэггом [4-6]¹⁾. Вскоре были определены положения атомов в кристаллах, что и легло в основу работ, изложенных в первых главах т. 2 [7]. Сразу после 1912 г. теория рассеяния рентгеновских лучей развивалась в нескольких направлениях. Лауэ и его сотрудники пользовались довольно сложными математическими методами для описания своих результатов. Вскоре, однако, Брэгги показали, что задачу можно рассматривать гораздо проще — как отражение рентгеновских лучей от плоскостей кристалла. Полученный таким путем закон дифракции (закон Брэггов) подробно рассмотрен в книге [7]²⁾. Из него следует, что при отражении рентгеновских лучей угол скольжения θ определяется формулой

$$n\lambda = 2d \sin \theta,$$

где λ — длина волны, n — порядок пучка, d — расстояние между плоскостями решетки. Можно показать также, что если рассеивающее вещество распределено по синусоидальному закону, то остается только значение $n = 1$, так что указанное соотношение упрощается, принимая вид

$$\lambda = 2d \sin \theta.$$

Этот факт, установленный в 1915 г. У. Г. Брэггом [8], лежит в основе многих работ по теории рассеяния рентгеновских лучей.

Совсем иной подход к теории рассеяния был предложен Эвальдом [9, 10]. Своей предыдущей деятельностью Эвальд был подготовлен к постановке систематических исследований по ди-

¹⁾ См. также библиографию в конце книги.

²⁾ См. также [27-29]. Отметим также, что одновременно с Брэггом рассматриваемое соотношение было получено Ю. В. Вульфом. По этой причине его часто называют законом Вульфа — Брэгга. — *Прим. ред.*

фракции рентгеновских лучей. Математический метод, развитый им ранее в связи с задачей об оптической дифракции (мы рассмотрели его в гл. 4, § 3), был в равной мере применим и в случае дифракции рентгеновских лучей (чего нельзя сказать о менее детальной модели Друде — Лорентца). Все, что Эвальд должен был сделать, — это предположить, что длина волны электромагнитного излучения лежит в рентгеновском диапазоне. Метод Эвальда позволил построить весьма сложную (так называемую динамическую) теорию рассеяния рентгеновских лучей. Он, как и другие эквивалентные ему методы, обладает одной особенностью, отсутствующей при более простом подходе (например, у Брэггов): здесь учитывается многократное рассеяние, или интерференция различных плоских волн, соответствующих различным рассеянным волнам. Мы рассмотрим этот метод в § 3 данной главы; там будет показано, что существует очень тесная связь между задачей о рассеянии рентгеновских лучей и проблемой расчета энергетических зон в кристаллах, изложенной в [7]¹⁾. Более простые методы аналогичны приближению в теории энергетических зон, использующему только одну плоскую волну или комбинацию небольшого их числа. Напротив, метод Эвальда эквивалентен строгому рассмотрению задачи о разложении искомого решения по плоским волнам. Другими словами, математические трудности, встречающиеся при решении такой задачи с периодическим потенциалом, были преодолены уже в теории рассеяния рентгеновских лучей еще в 1916 г. Интересно, что Эвальд в своей первой работе [9] ссылается на решение подобной задачи, данное Рэлеем [11] еще в 1892 г.

Все эти различные трактовки задачи о рассеянии рентгеновских лучей фактически составляют одну из ветвей оптики и потому тесно связаны со многими другими вопросами, рассматриваемыми в данной книге. Соответственно мы и изложим их в данной главе. Начнем с самого простого и наиболее элементарного способа рассмотрения, ближе всего следующего идеям Брэггов. В последующих параграфах мы перейдем и к более сложным теориям.

Установим связь обсуждаемого вопроса с задачей о рассеянии света свободными электронами, рассмотренной в гл. 1. Если на электрон не действуют квазиупругая сила и сила трения, то уравнение его движения принимает вид

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -e \mathbf{E}.$$

¹⁾ См. также [30]. — *Прим. ред.*

Следовательно, в случае синусоидального поля с угловой частотой ω

$$-m\omega^2\mathbf{x} = -e\mathbf{E},$$

или

$$\mathbf{x} = \frac{e\mathbf{E}}{m\omega^2}.$$

Дипольный момент, создаваемый таким электроном, равен $-e\mathbf{x}$, т. е.

$$\mathbf{M} = -\frac{e^2}{m\omega^2}\mathbf{E}, \quad (6.1)$$

что дает вектор поляризации (дипольный момент единицы объема), равный

$$\mathbf{P} = -\frac{Ne^2}{m\omega^2}\mathbf{E}. \quad (6.2)$$

Здесь N — число электронов в единице объема. Используя формулу (4.6), получаем диэлектрическую проницаемость

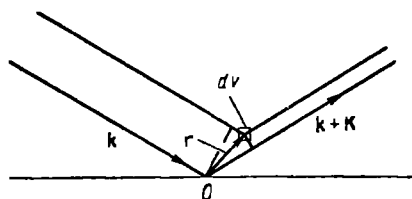
$$\kappa_e = 1 - \frac{Ne^2}{m\omega^2\epsilon_0}.$$

В случае рентгеновских лучей, когда частота велика по сравнению со всеми другими характерными частотами, это выражение представляет собой предельный случай формулы (4.6). Мы ограничимся для простоты этим предельным случаем.

Формула (4.25) дает вектор Герца, создаваемый элементарным диполем, а формулы (4.26) — соответствующие компоненты электрического и магнитного полей. Подставляя в них значение \mathbf{M} из (6.1), получаем выражение для рассеянной волны. Таким путем мы приходим к формуле Дж. Дж. Томсона, полученной им задолго до открытия дифракции рентгеновских лучей. Таким образом, эти результаты были хорошо известны Лауэ, Брэггам и другим исследователям, работавшим в данной области.

Вполне естественно было предположить, что число электронов в единице объема N меняется внутри атомов кристалла от точки к точке, приводя к пространственному изменению диэлектрической проницаемости и к рассеянию. Следует помнить, конечно, что в те времена Бор только начинал свои исследования атома водорода, так что учение о распределении электронов в атоме было в зачаточном состоянии. Однако уже господствовала выдвинутая Резерфордом в 1911 г. идея о том, что электроны каким-то образом движутся вокруг ядра. Чтобы найти рассеянный пучок рентгеновских лучей, естественно было сложить пучки, рассеянные дипольными моментами различных элементов объема. Посмотрим, как это делается,

На фиг. 6.1 представлена следующая схема. На небольшой кристалл падает рентгеновский пучок с волновым вектором k ; отражается рассеянный пучок с волновым вектором $k + K$, где, согласно [7]¹⁾, K есть вектор, перпендикулярный атомным плоскостям, на которых происходит рассеяние; величина его равна $2\pi/d$ (d — постоянная решетки). Пусть падающий пучок плоскопараллелен, а рассеянный пучок наблюдается на очень большом расстоянии от образца, т. е. мы имеем случай дифракции Фраунгофера. Рассмотрим вклад, вносимый в рассеянную волну дипольным моментом малого элемента объема dv . При выводе



Фиг. 6.1. Схема брэгговского рассеяния.

Падающая волна с волновым вектором k рассеивается горизонтальной атомной плоскостью в направлении волнового вектора $k + K$. Разность фаз между волнами, рассеянными малым элементом объема dv , и атомом, помещенным в начале координат O , равна $K \cdot r$, где r — радиус-вектор элемента объема dv .

формулы (4.26) для напряженности поля предполагалось, что мы находимся достаточно далеко от образца, так что всюду, кроме фазового множителя $\exp[i(\omega t - kr)]$, можно пренебречь зависимостью рассеянной волны от расстояния r и угла θ . Соответственно в указанной формуле можно отбросить все члены, кроме этой экспоненты.

Фаза колебаний диполя в элементе объема dv , разумеется, определяется фазой падающей волны в том месте, где находится этот объем. Фаза вклада этого объема в рассеянную волну в удаленной точке наблюдения определяется разностью хода лучей от фронта падающей волны до фронта рассеянной волны (см. фиг. 6.1). Из нашей схемы видно, что результирующая разность фаз больше разности фаз, возникающей при рассеянии на атоме, расположенном в начале координат O , на величину $k \cdot r$, но меньше ее на величину $(k + K) \cdot r$. Таким образом, пространственная часть экспоненты отличается от соответствующей величины для рассеяния в точке O множителем $\exp(iK \cdot r)$, где r — радиус-вектор элемента объема dv . [Не следует путать его с величиной r в формуле (4.25), которая

¹⁾ См. также [13, 28, 29]. — Прим. ред.

характеризует расстояние от диполя до точки наблюдения.] Теперь можно найти амплитуду рассеянной волны, интегрируя по всем элементам объема, т. е. вычисляя интеграл

$$\oint \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) N dv. \quad (6.3)$$

Но это равносильно вычислению фурье-компоненты плотности заряда с волновым вектором \mathbf{K} . Таким образом, мы приходим к важному факту, установленному У. Г. Брэггом [6]: рассеяние в данном направлении определяется одной из фурье-компонент плотности заряда.

Чтобы должным образом вычислить названную фурье-компоненту, необходимо интегрировать по кристаллу, содержащему очень много атомов. С другой стороны, наши геометрические построения были основаны на том, что размеры кристалла малы по сравнению с расстоянием до точки наблюдения. Для образца обычных размеров эти два условия не являются несовместимыми, если принять во внимание крайне малую величину межатомных расстояний. Если, однако, мы имеем дело с предельно малым образцом, например с крупинкой очень мелко помолотого порошка, то малые размеры образца становятся существенными и проявляются в уширении резких максимумов, предсказываемых формулой Вульфа — Брэгга. Этот очень простой и несложный для изложения факт имеет важные экспериментальные следствия; однако мы не станем здесь прерывать изложение и исследовать этот вопрос глубже, отложив это до § 6.

Так как в идеальном кристалле плотность заряда представляет собой периодическую функцию, повторяющуюся в каждой ячейке, то интеграл (6.3) будет равен нулю, если только вектор \mathbf{K} не равен одному из векторов обратной решетки (см. [7]). Поэтому брэгговское отражение будет иметь место только в том случае, если вектор \mathbf{K} равен одному из векторов обратной решетки. Амплитуда рассеянной волны (квадрат которой дает интенсивность волны) будет содержать в качестве множителя фурье-компоненту (6.3). Этот факт лежит в основе большинства приложений рентгеноструктурного анализа, при котором экспериментально определяются интенсивности различных рассеянных пучков, и найденные таким путем фурье-компоненты используются для гармонического синтеза плотности заряда; последнюю, таким образом, можно определять непосредственно из опыта. Описание первых шагов на пути практического применения этого метода можно найти в статье У. Л. Брэгга [12], где излагаются методы практического гармонического синтеза. Основная трудность метода состоит в том, что, позволяя экспе-

риментально определить амплитуды фурье-разложения, он не дает никакой информации о фазах, т. е., например, о том, имеем ли мы дело с синусоидальными членами или с косинусоидальными. Эту крайне важную информацию приходится получать из других опытных данных. Возникают также и другие экспериментальные осложнения, связанные со многими пунктами теории, которые мы в нашем поверхностном изложении оставили без внимания, но которые очень важны при количественной трактовке задачи.

Хотя связь фурье-компонент плотности рассеивающего вещества с интенсивностью рассеяния в данном направлении применительно к рентгеновским лучам впервые была рассмотрена У. Г. Брэггом в 1915 г., для оптиков, как отметил У. Л. Брэгг в своей статье [12], такая связь не является чем-то новым. Подобная ситуация встречается в теории микроскопа, развитой Аббе еще в прошлом веке. Аббе интересовался способностью микроскопа разрешать повторяющиеся в пространстве объекты, и эту проблему он решал в два этапа. Сначала он вычислял дифракционную картину, получающуюся при рассеянии падающего света периодической структурой, а затем задавался вопросом, как с помощью системы линз превратить эту картину в изображение. Естественно, при рассмотрении дифракции на периодической структуре он пользовался теми же математическими методами, которые потом использовались в теории рассеяния рентгеновских лучей. В последнем случае у нас нет ничего эквивалентного системе линз. Соответственно синтез Фурье производится математически, приводя к картине, которая в сущности есть не что иное, как увеличенное изображение расположения атомов. При этом получается по существу тот же результат, что и в оптическом микроскопе, как это и подчеркивается авторами многочисленных современных руководств по методам рентгеноструктурного анализа.

§ 2. Атомный фактор и структурный множитель¹⁾

Как уже упоминалось, в те времена, когда начиналось исследование дифракции рентгеновских лучей, учение о строении атома находилось в зачаточном состоянии. Тем не менее естественно было предположить, что в каждом атоме заряд распределен сферически симметрично и что плотность заряда всего кристалла определяется суперпозицией сферических атомных зарядов. Эти предположения приводят к очень важной для дальнейшего трактовке фурье-компонент (6.3). Очевидно, выражение

¹⁾ Более подробно содержание этого параграфа, а также остальной части данной главы изложено в работе [13].

(6.3) можно представить в виде суммы вкладов от различных атомов. Вычислим эти вклады и посмотрим, как получается из них полная фурье-компонента.

Начнем с одного атома, который поместим в начале координат. Пусть плотность заряда будет $\rho(r)$, где r — расстояние от начала координат. В квантовомеханическом случае она будет, разумеется, равна сумме величин $\psi^*\psi$ для различных электронов (в одноэлектронной модели) или соответствующей характеристике многоэлектронной задачи. Помножим плотность заряда на плоскую волну $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ и проинтегрируем по всему объему. При этом удобно воспользоваться известным разложением плоской волны по шаровым функциям угла и сферическим функциям Бесселя от радиальной координаты r :

$$\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) = \sum_l (2l + 1) i^l P_l(\cos \theta) j_l(|\mathbf{K}|r). \quad (6.4)$$

Здесь полярная ось сферической системы координат выбрана в направлении волнового вектора \mathbf{K} . Если умножить выражение (6.4) на сферически симметричное распределение заряда и проинтегрировать, то все шаровые функции, за исключением гармоники с $l = 0$, при интегрировании дадут нуль, и мы получим

$$\int \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \rho(r) dv = \int j_0(|\mathbf{K}|r) \rho(r) dv. \quad (6.5)$$

Но $j_0(x) = (\sin x)/x$, и потому

$$\begin{aligned} \int \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) \rho(r) dv &= \int \frac{\sin(|\mathbf{K}|r)}{|\mathbf{K}|r} \rho(r) dv = \\ &= 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(|\mathbf{K}|r)}{|\mathbf{K}|r} \rho(r) r^2 dr. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Последнее выражение мы обозначим через f и будем называть атомным фактором. Если выразить эту величину не через истинную плотность $\rho(r)$, а через радиальную плотность заряда $U(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$ [$U(r) dr$ есть полный заряд, заключенный между сферическими поверхностями с радиусами r и $r + dr$], то она примет вид

$$f = \int_0^\infty \frac{\sin(|\mathbf{K}|r)}{|\mathbf{K}|r} U(r) dr. \quad (6.7)$$

В рентгенографии часто используется формула Брэгга $\lambda = 2d \sin \theta$, где θ есть угол скольжения падающего луча. Ком-

бинируя ее с соотношением $|\mathbf{K}| = 2\pi/d$, мы можем переписать $|\mathbf{K}|$ в виде

$$|\mathbf{K}| = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}. \quad (6.8)$$

Согласно формулам (6.7) и (6.8), атомный фактор f при заданной длине волны рентгеновских лучей λ зависит от угла рассеяния θ . При $\theta = 0$ плоская волна $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ сводится к единице, а f — к интегралу от $\rho(r)$ по объему V атома. Если выбрать такую систему единиц, чтобы величина ρ представляла число электронов на единицу объема, то, как легко видеть, при стремлении угла θ к нулю фактор f стремится к полному числу электронов в атоме. С ростом угла θ величина f уменьшается тем быстрее, чем больше распределен атом в пространстве. Если бы заряд всех электронов был точечным и сосредоточенным в ядре, то величина f не зависела бы от θ , так как тогда в формуле (6.7) вклад в интеграл давали бы лишь очень малые значения r , при которых независимо от $|\mathbf{K}|$ (а следовательно, и от θ) $\sin(|\mathbf{K}|r)/(|\mathbf{K}|r) = 1$. В формуле (6.7) атомный фактор f непрерывно зависит от θ , но в реальных случаях мы, конечно, получаем функцию от дискретных значений $|\mathbf{K}|$, соответствующих различным векторам обратной решетки.

Предположим теперь, что элементарная ячейка кристалла содержит несколько атомов с атомными факторами f_i и радиусами-векторами \mathbf{r}_i . Тогда величина вида (6.3) получается суммированием по всем атомам элементарной ячейки. Вклад атома, расположенного в точке \mathbf{r}_i , в интеграл (6.3) отличается от вклада атома в начале координат множителем $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i)$. Следовательно, вклад всех атомов элементарной ячейки в интеграл (6.3) равен

$$F = \sum_i f_i \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_i). \quad (6.9)$$

Величина F называется структурным множителем и, подобно атомному фактору, зависит от угла θ и от длины волны λ .

Теперь нужно выполнить суммирование по всем элементарным ячейкам кристалла. Обозначим вектор, проведенный из начала координат в некоторую элементарную ячейку, через \mathbf{R}_i . Как обычно, представим его в виде $\mathbf{R}_i = n_{i1}\mathbf{t}_1 + n_{i2}\mathbf{t}_2 + n_{i3}\mathbf{t}_3$, где n — целые числа, а \mathbf{t} — единичные векторы решетки. Тогда вклад в рассеяние от i -й элементарной ячейки отличается от вклада ячейки, расположенной в начале координат, множителем $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i)$. Так как $\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i = 2\pi l$ при рассеянии точно в направлении, заданном формулой Вульфа — Брэгга, все элементарные ячейки будут вносить один и тот же вклад. Дело, однако,

обстоит иначе, если рассеяние происходит в несколько ином направлении. В этом случае приходится учитывать влияние конечных размеров образца, к чему мы обратимся в § 6.

Итак, мы показали, как выразить интеграл (6.3) через структурный множитель и атомный фактор. Как уже говорилось, исходя из наблюдаемых интенсивностей различных брэгговских максимумов, можно найти соответствующие фурье-компоненты, произвести гармонический синтез и таким путем экспериментально определить плотность заряда в каждой точке кристалла. Один из первых опытов такого рода был поставлен в 1925 г. для щелочногалоидных кристаллов и описан в работе [14]. При этом оказалось возможным найти сферические распределения заряда в ионах щелочных металлов и галогенов. Заметим, что это происходило до появления волновой механики, так что результаты нельзя было сравнить с теоретическими расчетами. После 1928 г., когда появились расчеты самосогласованного поля Хартри, стало возможным сравнивать результаты таких измерений с теорией. Джеймс и Бриндли [15, 16] в 1931 г., исходя из волновых функций, найденных Хартри, вычислили атомные факторы, подведя тем самым итог работе по исследованию различных аспектов рассеяния рентгеновских лучей [17, 18], в том числе и по изучению влияния теплового движения¹⁾. Хартри заинтересовался подобными проблемами еще до создания квантовой механики [19, 20]. В конце концов оказалось, что квантовомеханические расчеты распределения заряда хорошо согласуются с опытом. В современных исследованиях по рентгенографии многократно выполнялось сопоставление наблюдаемых атомных факторов с их теоретическими значениями. Ссылки на работы, представленные в библиографии в конце книги, указаны в конце главы.

§ 3. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей

Изложенная выше весьма элементарная теория имеет много недостатков. Один из них был отмечен Дарвином в работе [21], составившей одну из первых попыток строгого рассмотрения дифракции рентгеновских лучей. Как уже отмечалось, в рамках принятой выше постановки задачи все элементарные ячейки кристалла вносят один и тот же вклад в рассеянный пучок. Ясно, что это невозможно, так как при увеличении размеров кристалла интенсивность рассеянного пучка неограниченно возрастала

¹⁾ Задача о влиянии теплового движения решеток на интенсивность рассеяния рентгеновских лучей была предметом подробного исследования С. Г. Калашникова и М. А. Леонтовича [31]. — *Прим. ред.*

бы и в конце концов превысила бы интенсивность падающего пучка. Очевидно, что-то в нашем рассмотрении было упущено.

Дарвин показал, что именно было упущено, рассматривая рассеяние отдельными слоями по мере распространения пучка в глубь кристалла ¹⁾. Если верхний слой атомов или элементарных ячеек рассеивает некоторую часть излучения, то очевидно, что излучение, проникающее далее во второй слой, будет соответствующим образом ослаблено. То же самое произойдет в каждом слое. В результате пучок, проходящий через образец, будет ослабляться, или затухать, как раз настолько, чтобы уравновесить рассеяние. Поэтому неправильно предполагать, что волна рассеивается элементами объема кристалла, не претерпевая изменений; скорее следует считать ее затухающей и рассматривать рассеяние этой затухающей волны атомами кристалла. В действительности, однако, приходится идти еще дальше. Дело в том, что волна, рассеянная слоем атомов назад, может вновь рассеяться вперед другим слоем, через который она уже проходила. Таким образом, мы приходим к идее многократного отражения и убеждаемся, что для правильного решения задачи необходимо учитывать интерференцию всех возможных рассеянных волн.

Разумеется, именно это и делал Эвальд в своих расчетах, описанных в гл. 4, § 3. Он представлял поле излучения в виде суперпозиции всевозможных волн с волновыми векторами $\mathbf{k} + \mathbf{K}$, находил поле, создаваемое ими в том месте, где находится диполь, и предполагал, что дипольный момент определяется суммой всех волн. Чтобы выбрать правильный путь решения, обратимся к результату Эвальда, выраженному формулой (4.37). Она описывает разложение вектора Герца в кристалле по плоским волнам с волновыми векторами $\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}_h$, где $\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i$ есть волновой вектор главной компоненты электромагнитной волны, а \mathbf{K}_h — один из векторов обратной решетки. Амплитуда одной из этих волн имеет в знаменателе множитель $\omega^2/c^2 - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}_h)^2$. Таким образом, большой амплитудой будут обладать те волны, для которых знаменатель мал. В гл. 4, где этот метод применялся к видимой части спектра, величины ω/c и $|\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i|$ были очень малы по сравнению со значением любого из векторов \mathbf{K}_h ; это означает, что главным был член с $\mathbf{K}_h = 0$. Остальные члены, как показано в гл. 4, § 3, приводят к поправке Лорентца.

В рентгеновской части спектра положение совсем иное. Здесь уже отношение ω/c сравнимо с величинами векторов \mathbf{K}_h . Если угол наблюдения не соответствует брэгговскому отражению, то

¹⁾ Рассуждения Дарвина частично изложены в § 6 данной главы.

интенсивной будет только одна волна, для которой величина ω^2/c^2 равна или почти равна $(\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i)^2$. Если же наблюдать под одним из брэгговских углов, то, как мы знаем, существует такой вектор обратной решетки \mathbf{K} , что волновые векторы $\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i + \mathbf{K}$ и $\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i$ имеют одну и ту же длину. Квадраты обоих векторов равны ω^2/c^2 , и им соответствуют большие амплитуды. Таким образом, мы приходим к выводу, что в указанных условиях не может существовать только одна волна; должна возникать еще одна волна, также с большой амплитудой, соответствующая брэгговскому рассеянию. Теперь мы получили все ингредиенты теории рассеяния рентгеновских лучей. Эвальд в своих работах 1916 г. [9], пользуясь изложенным методом, развил теорию, называемую ныне динамической теорией рассеяния рентгеновских лучей.

Эта теория имеет один серьезный недостаток: в формуле (4.37) не содержится ничего похожего на атомный фактор или структурный множитель. Вместе с тем результаты предыдущего параграфа заставляют ожидать, что эти величины будут играть важную роль в теории рассеяния рентгеновских лучей. Дело в том, что Эвальд ввел одно допущение: он предположил, что рассеивающее вещество состоит из точечных диполей, расположенных в узлах решетки Бравэ. Как известно, в этом случае атомный фактор не зависит от θ , т. е. от того, под каким углом наблюдается отражение; это и объясняет отсутствие атомного фактора в теории Эвальда. Обобщение трактовки Эвальда на случай непрерывного распределения рассеивающего вещества не составляет большого труда, но при этом мы пришли бы к некоторым другим, более поздним вариантам динамической теории, которые будут вскоре рассмотрены подробнее.

Не следует ставить в вину Эвальду этот пункт его теории. Необходимо помнить, что первоначально она была развита для преломления лучей оптического диапазона, а в этом случае безразлично, считать ли диполи локализованными на атомных ядрах или распределенными по конечному объему. Применение этого метода к рентгеновским лучам явилось лишь одним из «отходов» теории. Оно было предложено на заре рентгенографии, когда еще не была как следует понята связь между фурье-компонентами плотности заряда и амплитудами различных рассеянных волн.

В дальнейшем был развит ряд вариантов динамической теории рентгеновских лучей. Мы остановимся на одном из них, предложенном в 1931 г. Лауэ. Теория Лауэ возникла под влиянием работ Эвальда; подобно последним, она использует разложение поля по плоским волнам типа (4.30). Как и у Эвальда, предполагается, что это поле создается плотностями тока и за-

ряда в соответствии с уравнениями Максвелла. Кроме того, принимается, что вектор поляризации дается выражением (6.2) или более общей формулой, справедливой для частот, при которых нельзя пренебречь собственными частотами колебаний атомов. В сущности, единственно важное допущение сводится к утверждению о пропорциональности между вектором поляризации и напряженностью поля. В отличие от Эвальда Лауэ считает число электронов в единице объема N непрерывной периодической функцией координат, как это и предполагалось в предыдущих параграфах. Как видно, трактовка Лауэ представляет собой естественное обобщение теории Эвальда и не содержит никаких новых принципов. Имеется еще небольшое техническое отличие: Лауэ пользуется уравнениями не для вектора Герца \mathbf{Z} , а для электрической индукции \mathbf{D} . Вектор Герца очень удобен при рассмотрении поля изолированных диполей, колеблющихся в одном и том же направлении, но в задаче о рассеянии рентгеновских лучей эта модель не всегда хороша, и вектор Герца теряет большую часть своей ценности. Преимущество использования индукции \mathbf{D} состоит в том, что с помощью последней можно сразу найти напряженность электрического поля \mathbf{E} , а затем по формуле (6.2) и вектор поляризации.

Прежде чем перейти к изложению теории Лауэ, рассмотрим задачу в более общем виде. Диэлектрическая проницаемость и показатель преломления получаются из формулы (6.2); так как число электронов в единице объема N предполагается периодической функцией координат, то периодической функцией будет и показатель преломления. Ситуация аналогична той, которая возникает при рассмотрении уравнения Шредингера для движения электрона в периодическом потенциальном поле. Напомним, что при элементарном выводе уравнения Шредингера рассматривается волна де Бройля постоянной частоты (или энергии), длина которой меняется от точки к точке. В периодическом поле длина волны периодически зависит от координаты. Именно это и предполагается в теории дифракции рентгеновских лучей по Лауэ.

Таким образом, мы приходим к задаче о рассеянии рентгеновских лучей, зная решение уравнения Шредингера для соответствующей квантовомеханической задачи, рассмотренной в книге [7] при изучении энергетических зон¹⁾. До недавнего времени лишь малая часть исследователей, интересовавшихся динамической теорией рассеяния рентгеновских лучей, отдавала себе отчет в этом обстоятельстве²⁾. Соответственно две теории

¹⁾ См. также [30]. — *Прим. ред.*

²⁾ Указанное сходство было подчеркнуто автором в обзорной статье [22]. Аналогия с уравнением Шредингера была рассмотрена также в работах [23, 24].

развивались в общем независимо друг от друга, однако использование результатов зонной теории может во многом упростить динамическую теорию рассеяния. Но прежде чем перейти к практическим методам решения, обсудим некоторые различия между этими двумя задачами.

Основное отличие состоит в том, что у рентгеновских лучей длина волны меняется в пространстве гораздо меньше, чем у электронов. Показатель преломления рентгеновских лучей отличается от единицы на величину порядка 10^{-5} . Периодическое изменение с координатой претерпевает лишь эта очень малая величина. Таким образом, случай рентгеновских лучей аналогичен предельному случаю свободных электронов. Поэтому в отличие от случая электронов разложение поля по плоским волнам должно быстро сходиться, и можно ожидать, что оно окажется вполне пригодным для практических целей. Таким образом, теория Лауэ, использующая разложение по плоским волнам должна давать вполне удовлетворительные результаты. Как мы сейчас увидим, окончательные формулы ее очень похожи на те, которые получаются при решении уравнения Шредингера с периодическим потенциалом при помощи разложения по плоским волнам. Кроме того, все представления о зонах Бриллюэна, о разрешенных и запрещенных энергетических зонах и т. д. применимы к рентгеновским лучам в той же мере, что и к электронам.

Аналогия между этими двумя задачами была бы совсем полной, если бы электрическое поле не было векторной величиной и вместо скалярного уравнения волновой механики не нужно было решать уравнения Максвелла. Это ведет к некоторым осложнениям, связанным с направлением плоскости поляризации поперечных электромагнитных волн. Однако последние не приводят к сколько-нибудь значительным трудностям, а в отдельных частных случаях связь между двумя указанными проблемами оказывается очень тесной.

§ 4. Вариант динамической теории, предложенный Лауэ

Теория Лауэ исходит из разложения вектора электрической индукции \mathbf{D} в ряд вида (4.30). Мы не будем разбивать вектор \mathbf{k} на вещественную и мнимую части, хотя это можно было бы сделать. Имеем.

$$\mathbf{D} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{D}(\mathbf{K}) \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (6.10)$$

Из уравнения $\text{div } \mathbf{D} = 0$ следует, что

$$\sum_{\mathbf{k}} [(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K})] \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}]\} = 0. \quad (6.11)$$

Поскольку равенство (6.11) должно выполняться во всех точках пространства в любой момент времени, коэффициенты ряда должны быть равны нулю. Таким образом, получаем

$$(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K}) = 0, \quad (6.12)$$

откуда следует, что вектор $\mathbf{D}(\mathbf{K})$, т. е. коэффициент Фурье при $\exp\{i[\omega t - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}]\}$, должен быть перпендикулярен волновому вектору данной волны $\mathbf{k} + \mathbf{K}$. Причина, по которой Лауэ предпочитал разлагать в ряд не \mathbf{E} , а \mathbf{D} , состоит в том, что вектор \mathbf{E} не обладает этим свойством.

Теперь нужно получить разложение вектора \mathbf{E} . Поскольку он равен $\mathbf{D}/\epsilon_0 \kappa_e$, где κ_e — диэлектрическая проницаемость, периодически зависящая от координат, то задача сводится к разложению величины $1/\kappa_e$ в ряд по функциям $\exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$. Положим

$$\frac{1}{\kappa_e} = \sum_{\mathbf{K}} \omega(\mathbf{K}) \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}). \quad (6.13)$$

Коэффициенты $\omega(\mathbf{K})$ можно выразить через фурье-компоненты плотности заряда и, следовательно, через структурные множители.

В рассматриваемом предельном случае диэлектрическая проницаемость, согласно (5.32), равна

$$\kappa_e = 1 - \frac{Ne^2}{m\epsilon_0\omega^2}. \quad (6.14)$$

Это выражение можно записать в виде

$$\kappa_e = 1 - \frac{e^2}{m\epsilon_0\omega^2} \sum_{\mathbf{K}} \frac{F(\mathbf{K})}{\Omega} \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}), \quad (6.15)$$

где F — структурный множитель, определяемый формулой (6.9), а Ω — объем элементарной ячейки. Для проверки последнего соотношения достаточно умножить его на $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$ и проинтегрировать по объему элементарной ячейки. Диэлектрическая проницаемость очень близка к единице, поэтому с хорошим приближением можно написать

$$\frac{1}{\kappa_e} = 1 + \frac{e^2}{m\epsilon_0\omega^2} \sum_{\mathbf{K}} \frac{F(\mathbf{K})}{\Omega} \exp(-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}), \quad (6.16)$$

так что

$$\begin{aligned} \omega(\mathbf{K}) &= \frac{e^2}{m\epsilon_0\omega^2} \frac{F(\mathbf{K})}{\Omega} \quad \text{при } \mathbf{K} \neq 0, \\ \omega(0) &= 1 + \frac{(N)_{\text{ср}} e^2}{m\epsilon_0\omega^2} = \frac{1}{(\kappa_e)_{\text{ср}}}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Здесь $(N)_{\text{ср}}$ и $(\kappa_e)_{\text{ср}}$ — величины, усредненные по элементарной ячейке, так что $(\kappa_e)_{\text{ср}}$ представляет собой обычную диэлектрическую проницаемость. Умножая выражение (6.10) для \mathbf{D} на (6.13) для $1/\kappa_e$, получаем $\epsilon_0 \mathbf{E}$:

$$\epsilon_0 \mathbf{E} = \frac{1}{\kappa_e} \mathbf{D} = \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \omega(\mathbf{K}') \exp \{i[\omega t - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (6.18)$$

Выведем теперь волновое уравнение для \mathbf{D} . Уравнения Максвелла для немагнитной среды имеют вид

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{E} &= - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = - \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \text{rot } \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \end{aligned}$$

Если взять производную по времени от второго уравнения и ротор от первого и воспользоваться векторным тождеством

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E},$$

то получим

$$\text{rot rot } \mathbf{E} = \text{grad div } \mathbf{E} - \nabla^2 \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \text{rot } \mathbf{H} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}. \quad (6.19)$$

Подставляя сюда выражения для \mathbf{D} и \mathbf{E} из (6.10) и (6.18) и выполняя необходимые операции, находим

$$\begin{aligned} - \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \{(\mathbf{k} + \mathbf{K}) [(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')] - \\ - (\mathbf{k} + \mathbf{K})^2 \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')\} \omega(\mathbf{K}') \exp \{i[\omega t - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}]\} = \\ = \mu_0 \omega^2 \sum_{\mathbf{K}} \mathbf{D}(\mathbf{K}) \exp \{i[\omega t - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (6.20) \end{aligned}$$

Как и прежде, это равенство может выполняться во всех точках пространства в любой момент времени лишь в том случае, если совпадают все фурье-компоненты в отдельности. Поэтому

$$\begin{aligned} \epsilon_0 \mu_0 \omega^2 \mathbf{D}'(\mathbf{K}) = \sum_{\mathbf{K}'} \{(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2 \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') - \\ - (\mathbf{k} + \mathbf{K}) [(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')]\} \omega(\mathbf{K}'). \quad (6.21) \end{aligned}$$

Выделяя член с $\mathbf{K}' = 0$, перепишем результат в виде

$$\begin{aligned} \left[\frac{(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{D}(\mathbf{K}) + \sum_{\mathbf{K}' \neq 0} \omega(\mathbf{K}') (\mathbf{k} + \mathbf{K})^2 \times \\ \times \left\{ \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{K}) [(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')] }{(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2} \right\} = 0. \quad (6.22) \end{aligned}$$

Это уравнение по существу совпадает с результатом Лауэ, хотя наш вывод несколько отличается от его расчета. При получении последнего уравнения мы воспользовались соотношением $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$, где c — скорость света в пустоте.

Уравнение (6.22) имеет стандартный вид задачи на собственные значения. Мы сталкиваемся с ней, например, при решении уравнения Шредингера путем разложения волновой функции в ряд по базисным функциям. Как видно из формулы (6.10), величины $\mathbf{D}(\mathbf{K})$ представляют собой коэффициенты разложения по плоским волнам, которые и играют в данном случае роль базисных функций. Величина $(\mathbf{K} + \mathbf{k})^2 / (\kappa_e)_{\text{ср}}$ соответствует диагональному матричному элементу энергии; ω^2/c^2 играет роль собственного значения энергии E , а $\omega(\mathbf{K}')(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2$ — роль недиагонального матричного элемента между состояниями \mathbf{K} и $\mathbf{K} - \mathbf{K}'$. Единственное усложнение состоит в том, что в уравнение (6.22) входит величина

$$\mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{K}) [(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')] }{(\mathbf{k} + \mathbf{K})^2}, \quad (6.23)$$

а не просто $\mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$. Как отметил еще Лауэ, второй член в (6.23) представляет собой компоненту вектора $\mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$ в направлении волнового вектора $\mathbf{k} + \mathbf{K}$, так что все выражение (6.23) определяет компоненту $\mathbf{D}(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$, перпендикулярную $\mathbf{k} + \mathbf{K}$. При $\mathbf{K}' = 0$ второй член в силу (6.12) обращается в нуль, но в остальных случаях он отличен от нуля. Другими словами, роль коэффициентов, подлежащих определению из уравнения (6.22), играют компоненты вектора \mathbf{D} , перпендикулярные векторам $\mathbf{k} + \mathbf{K}$.

Теперь можно решать эти уравнения так же, как в квантовой механической теории возмущений. Приравнявая нулю определитель, составленный из коэффициентов уравнения при данном \mathbf{k} , получаем секулярное уравнение для ω^2 . В те времена, когда писали свои статьи Эвальд, Лауэ и др., еще не было вычислительных средств для решения таких секулярных уравнений. Соответственно названные авторы ограничивались рассмотрением простых частных случаев. Однако в наше время, когда появились вычислительные машины, легко получить решение с любой желаемой точностью, удерживая конечное число членов ряда. Достижение необходимой точности возможно благодаря быстрой сходимости ряда (6.10) обусловленной очень малыми значениями величин $\omega(\mathbf{K}')$ при $\mathbf{K}' \neq 0$.

Для решения уравнения (6.22) можно воспользоваться всей техникой, описанной в гл. 6 и 7 книги [7]¹⁾. Однако здесь в отли-

¹⁾ См. также [30]. — Прим. ред.

чие от случая электронов эти методы дают результаты, пригодные для практического использования. Начнем с определения диагональных матричных элементов энергии, пренебрегая всеми недиагональными элементами в уравнении (6.22). Получаем

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{(k + K)^2}{(\kappa_e)_{cp}}. \quad (6.24)$$

Эта формула означает просто, что частота и длина волны связаны друг с другом так же, как в плоской волне, распространяющейся в среде с постоянной диэлектрической проницаемостью $(\kappa_e)_{cp}$. Если рассматривать ω^2 как функцию от k , то для каждого значения K получится выражение вида (6.24). В тех точках обратной решетки, где две или более таких функций принимают одинаковые значения, недиагональные матричные элементы в (6.22) приведут к расщеплению двух или более значений ω . При этом в спектре величины ω как функции от k получатся разрывы, аналогичные запрещенным зонам в задаче Шредингера для периодического потенциала. Эти зоны отвечают областям значений ω , при которых распространение волны в кристалле невозможно, а могут существовать только затухающие волны. Это именно те волны, которые связаны с брэгговским отражением. В следующем параграфе мы покажем, что таким путем можно прийти к весьма полной трактовке брэгговского отражения.

§ 5. Дифракция рентгеновских лучей в случае синусоидально меняющегося показателя преломления

Прежде всего положим в (6.22) $K = 0$ и будем считать k волновым вектором в схеме расширенных зон, так что величина $k^2/(\kappa_e)_{cp}$ очень близка к ω^2/c^2 . Тогда уравнению (6.22) будут удовлетворять большие значения $D(0)$ и, вообще говоря, малые величины D при других значениях аргумента. Если, однако, существует такой вектор K' , что величина $(k + K')^2$ почти равна k^2 , так что выполняется условие Брэгга, то этому вектору K' также может соответствовать большой коэффициент $D(K')$. Нondiagonalный матричный элемент энергии возмущения, взятый между указанными состояниями, равен $\omega(K')(k + K')^2$. Поскольку речь идет о брэгговском отражении, существенным будет только этот матричный элемент и связанный с ним элемент, содержащий $\omega(-K')$. С хорошей точностью можно рассматривать это отражение, пренебрегая всеми другими величинами ω и считая отличными от нуля только коэффициенты $\omega(\pm K')$. При этом вместо суперпозиции, характерной для реального кристалла, мы будем иметь синусоидальное изменение показателя

преломления. В случае синусоидального показателя преломления, следуя методам, изложенным в [7]¹⁾, легко получить точное решение. Поскольку рассматриваемое брэгговское отражение определяется только матричными элементами с $\omega(\pm \mathbf{K}')$, это решение дает нам в сущности все, что требуется узнать из динамической теории.

Преобразуем теперь уравнение (6.22), опуская в сумме по \mathbf{K}' все члены, кроме слагаемых с данным вектором \mathbf{K}' и с $-\mathbf{K}'$. Тогда останутся только коэффициенты $\mathbf{D}(n\mathbf{K}')$, где n — целое число (отличные от нуля матричные элементы имеются только между этими плоскими волнами). Положим $\omega(\mathbf{K}') = \omega(-\mathbf{K}') = \omega$. Тогда уравнение (6.22) примет вид

$$\left[\frac{(k + n\mathbf{K}')^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{D}(n\mathbf{K}') + \omega(k + n\mathbf{K}')^2 \left(\mathbf{D}[(n-1)\mathbf{K}'] - \frac{(k + n\mathbf{K}') \{ (k + n\mathbf{K}') \cdot \mathbf{D}[(n-1)\mathbf{K}'] \}}{(k + n\mathbf{K}')^2} + \mathbf{D}[(n+1)\mathbf{K}'] - \frac{(k + n\mathbf{K}') \{ (k + n\mathbf{K}') \cdot \mathbf{D}[(n+1)\mathbf{K}'] \}}{(k + n\mathbf{K}')^2} \right) = 0. \quad (6.25)$$

Это уравнение имеет ту же форму, что и соответствующее уравнение Шредингера (см. [7], гл. 6, § 6). Последнее имеет вид $[(p+h)^2 - E(p)]v(p+h) - W[v(p+h-1) + v(p+h+1)] = 0$.

(6.26)

Здесь p — импульс, эквивалентный нашему \mathbf{k} , h — эквивалент $n\mathbf{K}'$, число E соответствует ω^2/c^2 , а $-W$ отвечает $\omega(k + n\mathbf{K}')^2$. Коэффициентам v в нашем случае соответствуют коэффициенты \mathbf{D} . Существенная аналогия состоит в том, что рассматриваемые уравнения связывают значения \mathbf{D} (или v) с тремя индексами: n , $n-1$ и $n+1$. Это дает рекуррентную формулу для \mathbf{D} (или v). С ее помощью, зная два значения \mathbf{D} как функции n , мы можем найти следующее значение и т. д. При стремлении n к бесконечности обычно оказывается, что \mathbf{D} неограниченно возрастает. Однако, выбирая должным образом первые два значения \mathbf{D} , можно добиться того, чтобы при больших n коэффициенты \mathbf{D} стремились к нулю. Как при положительных, так и при отрицательных значениях n это оказывается возможным лишь при некоторых определенных значениях ω^2/c^2 . Тем самым определяется зависимость частоты ω от волнового вектора \mathbf{k} .

Как можно показать (см. [7]), при малом отклонении от случая плоских волн (т. е. в нашем случае при малых ω) заметно отличны от нуля не более двух коэффициентов \mathbf{D} . Они представляют собой амплитуды падающей и единственной отражен-

¹⁾ См. также [30, 32]. — Прим. ред.

ной волн. Поскольку мы взяли \mathbf{k} в схеме расширенных зон, одним из этих больших коэффициентов \mathbf{D} будет $\mathbf{D}(0)$, а другим — либо $\mathbf{D}(\mathbf{K}')$, либо $\mathbf{D}(-\mathbf{K}')$ в зависимости от значения \mathbf{k} . Если предполагается, что $(\mathbf{k} + \mathbf{K}')^2 \approx \mathbf{k}^2$, то вторым большим коэффициентом \mathbf{D} будет $\mathbf{D}(\mathbf{K}')$. При этом мы имеем случай, показанный на фиг. 6.1, где вектор \mathbf{K}' обозначен через \mathbf{K} .

В нашем случае возникает одно усложнение по сравнению с задачей Шредингера, связанное с поляризацией волны. Возможны два варианта: 1) вектор \mathbf{D} перпендикулярен плоскости чертежа и 2) вектор \mathbf{D} лежит в плоскости чертежа. В первом случае величины $(\mathbf{k} + \mathbf{K}') \cdot \mathbf{D}(\mathbf{kK}')$ и т. д. будут равны нулю, а во втором они отличны от нуля. Обсудим сначала более простой первый вариант, а затем выясним, как меняется ситуация при переходе ко второму. В рассматриваемом случае уравнение (6.25) сводится к двум:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\mathbf{k}^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{D}(0) + \omega \mathbf{k}^2 \mathbf{D}(\mathbf{K}') &= 0, \\ \omega (\mathbf{k} + \mathbf{K}')^2 \mathbf{D}(0) + \left[\frac{(\mathbf{k} + \mathbf{K}')^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{D}(\mathbf{K}') &= 0. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Мы получили систему из двух однородных линейных уравнений с двумя неизвестными $\mathbf{D}(0)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{K}')$. Как обычно, она имеет нетривиальное решение только в том случае, если определитель, составленный из коэффициентов, равен нулю.

Соответствующее секулярное уравнение имеет вид

$$\left[\frac{\mathbf{k}^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right] \left[\frac{(\mathbf{k} + \mathbf{K}')^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right] - \omega^2 \mathbf{k}^2 (\mathbf{k} + \mathbf{K}')^2 = 0. \quad (6.28)$$

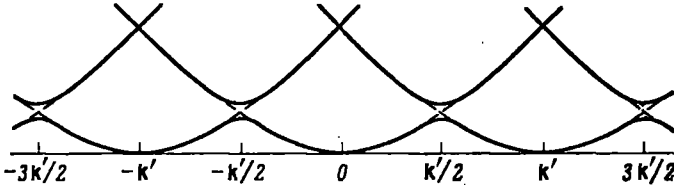
Отсюда определяется зависимость ω^2/c^2 от \mathbf{k} . Выписывать полное решение мы не будем ввиду его очевидности. Для исследования его удобно записать вектор \mathbf{k} в виде суммы двух компонент, одна из которых, \mathbf{k}_n , перпендикулярна отражающим плоскостям (т. е. параллельна вектору \mathbf{K}'), а другая, \mathbf{k}_t , параллельна этим плоскостям. Брэгговское отражение получается при $\mathbf{k}_n = -\mathbf{K}'/2$. В этой точке два выражения, определяющие плоские волны,

$$\frac{\mathbf{k}_n^2 + \mathbf{k}_t^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} = \frac{\omega^2}{c^2} \quad \text{и} \quad \frac{(\mathbf{k}_n + \mathbf{K}')^2 + \mathbf{k}_t^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} = \frac{\omega^2}{c^2}, \quad (6.29)$$

приводят к одному и тому же значению ω . Две кривые, изображающие зависимость ω от \mathbf{k}_n и описываемые уравнениями (6.29), представляют собой гиперболы. Они показаны на фиг. 6.2 вместе с другими гиперболами, получающимися из уравнения (6.25) при различных целочисленных значениях l . В каждой точке,

где нижняя часть одной гиперболы пересекается с соседней, две кривые «расталкиваются», как показано на фиг. 6.2.

Как видно из фиг. 6.2, картина аналогична той, которая получается для энергетических зон. Взаимодействие между различными функциями приводит к появлению узких запрещенных зон при $k_n = \pm K'/2, \pm 3K'/2, \dots$. Они соответствуют частотам, при которых в кристалле не могут распространяться незатухающие волны. Сейчас мы увидим, какой смысл имеет это утверждение. Если попытаться решить уравнение (6.28) для данного



Фиг. 6.2. Зависимость угловой частоты ω от компоненты k_n волнового вектора, нормальной к рассеивающей атомной плоскости.

Кривые соответствуют динамической теории рассеяния рентгеновских лучей [уравнения (6.28) и (6.29)]. Ширины запрещенных зон здесь резко преувеличены — в действительности они слишком узки, чтобы быть заметными.

случая, то окажется, что решение существует только при комплексных значениях k_n . Последние отвечают волнам, затухающим при распространении в глубь кристалла. Интересно оценить ширину запрещенной зоны. Ее можно найти, полагая в уравнении (6.28) $k_n = -K'/2$. При этом будем иметь

$$\left[\frac{(K'/2)^2 + k_t^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} - \frac{\omega^2}{c^2} \right]^2 = \omega^2 \left[\left(\frac{K'}{2} \right)^2 + k_t^2 \right]^2,$$

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{(K'/2)^2 + k_t^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} (1 \pm \omega), \quad (6.30)$$

$$\frac{\omega}{c} = \sqrt{\frac{(K'/2)^2 + k_t^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}}} \left(1 \pm \frac{1}{2} \omega \right).$$

В пренебрежении малой величиной ω формулы (6.30) дают то самое значение частоты, которое, согласно элементарной теории, отвечает брэгговскому отражению. Поскольку ω — очень малая величина, порядка 10^{-5} , видно, что затухающая волна существует только в непосредственной окрестности брэгговской частоты. Заметим, что в формулах (6.30) мы пренебрегли различием между ω и $\omega/(\kappa_e)_{\text{ср}}$, поскольку разность этих величин порядка 10^{-10} .

Найдем общее решение уравнения (6.28) в таком виде, чтобы явно получить упомянутые выше затухающие волны. Положим

$$\mathbf{k}_n = -\frac{K'}{2} + \Delta\mathbf{k}_n, \quad (6.31)$$

$$\frac{\omega^2}{c^2} = \frac{(K'/2)^2 + k_t^2}{(\kappa_e)_{\text{ср}}} + \Delta\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right) = \frac{\omega_B^2}{c^2} + \Delta\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right),$$

где $\Delta\mathbf{k}_n$ и $\Delta(\omega^2/c^2)$ — отклонения волнового вектора и величины ω^2/c^2 от брэгговских значений. При подстановке (6.31) в (6.28) все большие величины взаимно уничтожаются, а для малых величин получается уравнение

$$\left[-2\left(\frac{K'}{2}\right) \cdot \Delta\mathbf{k}_n - \Delta\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)\right] \left[2\left(\frac{K'}{2}\right) \cdot \Delta\mathbf{k}_n - \Delta\left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)\right] = \omega^2 \left(\frac{\omega_B}{c}\right)^4, \quad (6.32)$$

в котором мы отбросили члены высших порядков. Выполним умножение и воспользуемся соотношением

$$\frac{|K'|}{2} = \frac{\omega_B}{c} \sin \theta_B, \quad (6.33)$$

вытекающим из формулы Вульфа—Брэгга, если пренебречь в ней слабым влиянием показателя преломления $(\kappa_e)_{\text{ср}}$. Здесь θ_B — угол Брэгга для предполагаемой частоты. Получим

$$\Delta\mathbf{k}_n = \pm \frac{\omega_B}{c} \frac{1}{\sin \theta_B} \sqrt{\left(\frac{\Delta\omega}{\omega_B}\right)^2 - \left(\frac{\omega}{2}\right)^2}. \quad (6.34)$$

Здесь использовано соотношение $\Delta(\omega^2) = 2\omega\Delta\omega$.

Из формулы (6.34) вновь вытекает результат (6.30): в самом деле, при $\mathbf{k}_n = -K'/2$, или $\Delta\mathbf{k}_n = 0$, квадратный корень должен быть равен нулю и $\Delta\omega = \pm\omega_B(\omega/2)$. Можно, однако, пойти дальше, заметив, что если величина ω/ω_B отклоняется от единицы более чем на $\pm\omega/2$, то величина $\Delta\mathbf{k}_n$ оказывается вещественной. При этом мы получаем уравнение семейства кривых, изображенных на фиг. 6.2. Формула (6.34) получена в приближении, пригодном только в непосредственной окрестности запрещенной зоны, т. е. вблизи точки $\mathbf{k}_n = -K'/2$ на фиг. 6.2. Внутри этой зоны, как нетрудно видеть, величина $\Delta\mathbf{k}_n$ — чисто мнимая и, как мы уже отмечали, имеет место затухание. Максимальное затухание получается при $\omega = \omega_B$, или $\Delta\omega = 0$. При этом

$$\Delta\mathbf{k}_n = \pm i \frac{\omega_B}{c} \frac{1}{\sin \theta_B} \frac{\omega}{2}. \quad (6.35)$$

Здесь виден эффект, рассмотренный Дарвином и упоминавшийся в начале § 3 данной главы. Наблюдаемое затухание воз-

никает вследствие отражения небольшой доли рентгеновских лучей от каждой кристаллической плоскости, в результате чего волна ослабляется по мере углубления внутрь кристалла. Этот эффект был назван Дарвином первичной экстинкцией. Обычно он не наблюдается, поскольку, согласно (6.35), это малый эффект, пропорциональный ω . Как отметил Дарвин [21], реальные кристаллы несовершенны. Они ведут себя так, как если бы они обладали тем, что Дарвин назвал мозаичной структурой, т. е. так, как если бы они состояли из большого числа очень маленьких кристалликов, ориентированных не совсем одинаковым образом и рассеивающих независимо. При этом интерференция, приводящая к описанному выше ослаблению пучка, возможна только между волнами, рассеянными атомами одного и того же кристаллика. Кристаллики обычно слишком малы для того, чтобы эффект первичной экстинкции был сколько-нибудь заметен.

Если мы хотим получить уравнение кривой $\omega(\mathbf{k}_n)$, показанной на фиг. 6.2, то удобнее всего решить уравнение (6.34) относительно $\Delta\omega/\omega_B$. Находим

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_B} = \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2 + \frac{\sin^2 \theta_B}{(\omega_B/c)^2} (\Delta\mathbf{k}_n)^2}. \quad (6.36)$$

Эта формула справедлива в непосредственной окрестности точки $\mathbf{k}_n = -\mathbf{K}'/2$. Она дает параболическое или гиперболическое разложение частоты ω около ее максимального или минимального значения в запрещенной зоне.

Рассмотренная только что задача о затухающих волнах внутри запрещенной зоны в равной мере относится и к случаю электронных энергетических зон. В приложении 2 указаны примеры, когда это оказывается важным для энергетических зон. Именно такие случаи возникают при вычислении волновых функций вблизи примесного атома или при расчете поверхностных волн на границе полупроводника. При этом волновые функции, которым соответствуют энергии внутри запрещенной зоны, таким же образом затухают по мере удаления от примесного атома или от поверхности кристалла. Основное отличие состоит в том, что в задаче Шредингера для периодического потенциала величины, соответствующие ω , оказываются гораздо больше, чем в случае рентгеновских лучей. Это приводит к очень быстрому затуханию, часто настолько значительному, что уже на удалении порядка нескольких атомных расстояний волновая функция спадает до малой доли начальной величины.

Выше мы рассматривали случай, когда вектор электрической индукции \mathbf{D} перпендикулярен плоскости, проходящей через падающий и отраженный лучи. Не составляет труда установить,

какие изменения возникнут при переходе к другому типу поляризации, когда вектор \mathbf{D} лежит в плоскости волновых векторов. Как видно из уравнения (6.25), в этом случае величины $\mathbf{D}[(n - 1)\mathbf{K}']$ и т. д., которые умножаются на малую величину ω , будут заменены более сложными выражениями, представляющими собой компоненты вектора $\mathbf{D}[(n - 1)\mathbf{K}']$ и т. д. в направлении, перпендикулярном волновому вектору $\mathbf{k} + n\mathbf{K}'$. В частном случае, описываемом уравнениями (6.27), когда существуют лишь две волны, угол между одним из векторов $\mathbf{D}(0)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{K}')$ и волновым вектором другой волны, как видно из фиг. 6.1, равен 2θ . Поэтому чтобы перейти к случаю другой поляризации, достаточно лишь умножить члены $\omega k^2 \mathbf{D}(\mathbf{K}')$ и $\omega (\mathbf{k} + \mathbf{K}')^2 \mathbf{D}(0)$ на $\cos 2\theta$. Такое же исправление можно внести и в остальную часть расчета, заменяя всюду ω на $\omega \cos 2\theta$. Это приведет к количественным различиям для двух поляризаций, но качественная ситуация в обоих случаях будет одной и той же.

§ 6. Рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами

Мы изложили динамическую теорию в основном для того, чтобы показать ее сходство с задачей Шредингера для периодического поля (например, поля кристаллической решетки). Однако она довольно далека от того, что требуется для рассмотрения реальных кристаллов. Последние, как уже упоминалось, несовершенны, в результате чего глубина проникновения излучения недостаточна, чтобы можно было наблюдать явление первичной экстинкции. Реальный кристалл действует на излучение так, как если бы он состоял из большого числа очень малых областей, каждая из которых рассеивает независимо от остальных. Имеется обширная литература (список ее можно найти в монографии [13]), посвященная различным моделям реальных кристаллов и выводу формул для рассеяния в данном направлении. Поскольку в настоящей книге теория дифракции рентгеновских лучей рассматривается в основном для того, чтобы продемонстрировать ее связь с другими разделами теории твердого тела, большинство этих вопросов здесь излагаться не будет. Однако, желая дать читателю представление о применяемых методах, мы наметим здесь одно из стандартных рассуждений. Оно было дано в 1921 г. в работе [25].

Авторы указанной работы исходят из результатов, полученных Дарвином [24] в 1914 г. Дарвин исследовал сначала рассеяние одной плоскостью диполей, после чего вычислил интенсивность рассеяния всем кристаллом, суперпонируя результаты, полученные для отдельных плоскостей. Воспроизведем сначала

этот результат Дарвина. С помощью фиг. 6.1 найдем напряженность электрического поля рассеянной волны в точке P , отстоящей от начала координат на расстояние R в направлении рассеяния. Будем считать при этом, что рассеяние происходит на элементарной ячейке, находящейся вблизи начала координат. Рассмотрим случай, когда искомая напряженность поля \mathbf{E} направлена по оси x (см. фиг. 6.1), т. е. перпендикулярно плоскости, в которой лежат падающий и рассеянный лучи. Согласно (6.2), внешнее поле будет создавать в элементе объема dv рассеивающего вещества дипольный момент

$$d\mathbf{P} = - \frac{Ne^2}{m\omega^2} \mathbf{E} dv.$$

Пользуясь формулой (4.26), можно найти теперь x -компоненту напряженности поля для волны, рассеянной этим элементом объема и наблюдаемой в точке P :

$$d\mathbf{E} = - \frac{(Ne^2/m\omega^2) \mathbf{E} dv}{4\pi\epsilon_0} \frac{k^2}{R} \exp[i(\omega t - kR)]. \quad (6.37)$$

Выражение (6.37) получается из E_0 в формуле (4.26), если оставить там только член с $1/kr$ (главный на больших расстояниях), подставить соответствующее данному случаю значение $\sin \theta = 1$ и учесть, что поле E_0 направлено противоположно дипольному моменту.

Просуммируем теперь члены вида (6.37) сначала по объему одного атома, а затем по всем атомам элементарной ячейки. Если элемент объема расположен не в начале координат, а в точке \mathbf{r} , как на фиг. 6.1, то, как и при вычислении интеграла (6.3), нужно учитывать разность хода падающего и рассеянного лучей, умножая (6.37) на множитель $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r})$. Интегрируя полученный результат по объему атома, находим вклад последнего в виде

$$- \frac{fe^2/m\omega^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{k^2}{R} \exp[i(\omega t - kR)] \mathbf{E}. \quad (6.38)$$

Здесь атомный фактор f определяется формулами (6.5) — (6.8). Аналогично, суммируя по всем атомам элементарной ячейки, мы заменяем f на структурный фактор F , определяемый формулой (6.9). Используя соотношение $k = \omega/c$, получаем

$$- \frac{Fe^2/mc^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp[i(\omega t - kR)]}{R} \mathbf{E}. \quad (6.39)$$

Теперь нужно просуммировать это выражение по всем элементарным ячейкам, расположенным в плоскости отражения

(см. фиг. 6.1), т. е. в плоскости $z = 0$. Следуя Дарвину, мы применим для вычисления этой суммы метод зон Френеля. Рассмотрим элементарную ячейку в точке с координатами $x, y, 0$. Пусть точка P имеет координаты $0, R \cos \theta, R \sin \theta$. Тогда в этой точке разность хода между волной, рассеянной элементарной ячейкой в точке $x, y, 0$, и волной, рассеянной ячейкой, помещенной в начале координат, составит

$$\sqrt{x^2 + (R \cos \theta - y)^2 + (R \sin \theta)^2} + y \cos \theta - R. \quad (6.40)$$

Если x и y малы по сравнению с R , то, разлагая это выражение в ряд, получаем

$$R \left[1 - \frac{y}{R} \cos \theta + \frac{1}{2R^2} (x^2 + y^2 \sin^2 \theta) + \dots \right] + y \cos \theta - R = \frac{1}{2R} (x^2 + y^2 \sin^2 \theta) + \dots \quad (6.41)$$

Если в формуле (6.41) пренебречь членами более высокого порядка, то для вычисления полной напряженности поля рассеянной волны в точке P нужно будет просуммировать величины вида

$$-\frac{Fe^2/mc^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp[i(\omega t - kR)]}{R} \exp\left[-i\left(\frac{k}{2R}\right)(x^2 + y^2 \sin^2 \theta)\right] \mathbf{E}. \quad (6.42)$$

Пусть в единице объема кристалла содержится N элементарных ячеек и пусть период решетки в направлении вектора \mathbf{K} равен d . Тогда число элементарных ячеек на единицу площади в плоскости, перпендикулярной вектору \mathbf{K} , будет равно Nd . Если эти элементарные ячейки расположены так плотно, что экспоненциальный множитель быстро меняется от одной ячейки к другой (можно показать, что это условие всегда выполняется), то суммирование по элементарным ячейкам можно заменить интегрированием по координатам x и y . Амплитуда рассеянной волны в точке P равна

$$-Nd \frac{(Fe^2/mc^2)}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp[i(\omega t - kR)]}{R} \mathbf{E} \int \exp\left[-i\left(\frac{k}{2R}\right)(x^2 + y^2 \sin^2 \theta)\right] dx dy. \quad (6.43)$$

В этом выражении мы считаем величину R в знаменателе постоянной, не учитывая ее зависимости от x и y ; можно показать, что это полностью оправдано.

Интегралы вида (6.43) встречаются при изучении интегралов Френеля и спирали Корню (см., например, [26]¹⁾). Для вычисления интеграла в (6.43) рассмотрим эллипсы в плоскости xy

¹⁾ См. также [33]. — Прим. ред.

(см. фиг. 6.1), определяемые уравнением $x^2 + y^2 \sin^2 \theta = \text{const}$. Эти эллипсы представляют собой геометрические места точек с фиксированной фазой, равной $(k/2R)(x^2 + y^2 \sin^2 \theta)$. Если выбрать эллипсы, для которых эта величина равна $\pi, 2\pi, 3\pi, \dots$, то площади между двумя последовательными эллипсами будут представлять собой зоны Френеля. Они характерны тем, что вклады соседних зон отличаются друг от друга по фазе на 180° . Интеграл можно было бы записать в виде суммы вкладов отдельных зон. Для наших целей, однако, это не потребуется. Действительно, положим

$$v = \frac{k}{2R} (x^2 + y^2 \sin^2 \theta). \quad (6.44)$$

Мы должны определить элемент площади $dx dy$ или, скорее, интеграл по площади, заключенной между эллипсами, которым соответствуют величины v и $v + dv$. Уравнение

$$\frac{x^2}{2Rv/k} + \frac{y^2}{(2Rv/k)/\sin^2 \theta} = 1, \quad (6.45)$$

эквивалентное (6.44), представляет собой уравнение эллипса с полуосями $\sqrt{2Rv/k}$ и $\sqrt{(2Rv/k)/\sin^2 \theta}$. Площадь его, равная произведению полуосей, умноженному на π , составляет

$$S = \frac{2\pi Rv}{k \sin \theta}, \quad (6.46)$$

а площадь между эллипсами, соответствующими v и $v + dv$, равна

$$dS = \frac{2\pi R}{k \sin \theta} dv. \quad (6.47)$$

Поэтому интеграл в (6.43) преобразуется к виду

$$\int_0^\infty e^{-iv} \frac{2\pi R}{k \sin \theta} dv. \quad (6.48)$$

Выражение (6.48) не имеет определенного значения, поскольку интеграл от e^{-iv} , равный $e^{-iv}/(-i)$, осциллирует на верхнем (бесконечном) пределе. Стандартный прием в таких случаях состоит во введении в интеграл слабого затухания, соответствующего медленному уменьшению вклада от последовательных зон Френеля (мы вскоре увидим, что этот прием имеет физическое обоснование). Другими словами, мы заменяем интеграл

$$\int_0^\infty e^{-iv} dv$$

величиной

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-(i+\alpha)v} dv = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^{-(i+\alpha)v}}{-(i+\alpha)} \Big|_0^{\infty} = -i. \quad (6.49)$$

Вклад от верхнего предела значений v равен нулю при любом сколь угодно малом, но отличном от нуля значении α . Оправдание этой процедуры состоит в следующем. Пусть в действительности мы имеем дело не с бесконечным слоем элементарных ячеек, а с конечным слоем неправильной формы. Тогда чем больше зона Френеля, тем большая ее часть будет лежать вне рассматриваемого слоя атомов, так что в подынтегральном выражении появится множитель, представляющий собой часть зоны находящуюся внутри рассеивающего слоя. Этот множитель качественно ведет себя как введенная нами экспонента $e^{-\alpha v}$ и точно так же обеспечивает сходимость интеграла. Легко показать, что окончательный результат не зависит от конкретного вида указанного множителя при условии, что последний достаточно медленно меняется с изменением v . Эти вопросы обсуждаются в книге [26] или в другом учебнике оптики¹⁾.

Подставляя полученный результат в формулу (6.43), получаем для амплитуды рассеянной волны в точке P

$$\begin{aligned} Nd \frac{Fe^2/mc^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\exp[i(\omega t - kR)]}{R} E \frac{2\pi i R}{k \sin \theta} = \\ = i \frac{N d \lambda Fe^2/mc^2}{4\pi\epsilon_0 \sin \theta} E \exp[i(\omega t - kR)]. \end{aligned} \quad (6.50)$$

Здесь $\lambda = 2\pi/k$ — длина волны. Этот результат был получен Дарвином в [24].

Теперь нужно просуммировать по конечному числу параллельных слоев элементарных ячеек. Это число предполагается большим, но не настолько, чтобы необходимо было учитывать затухание, обусловленное первичной экстинкцией. Если угол падения точно равен θ , то все плоскости будут рассеивать в фазе и результирующая амплитуда будет равна выражению (6.50), умноженному на число слоев. Здесь, однако, пришло время рассмотреть вопрос, до сих пор упускавшийся нами из виду. Речь идет о том, что в кристалле конечной толщины рассеянный пучок будет уширяться и рассеяние будет происходить не только под брэгговским углом, но и под углами θ , несколько отличающимися от него. Следуя работе [25], положим угол θ равным брэгговскому углу θ_B плюс малый угол ϵ . Путем обычных рассуждений, используемых при выводе закона Вульфа — Брэгга,

¹⁾ См. также [24]. — Прим. ред.

найдем, что разность фаз волн, рассеянных последовательными плоскостями, составляет

$$2\pi \left(2d \frac{\sin \theta}{\lambda} \right) = \frac{4\pi d}{\lambda} \sin(\theta_B + \epsilon) = \frac{4\pi d}{\lambda} (\sin \theta_B \cos \epsilon + \cos \theta_B \sin \epsilon). \quad (6.51)$$

Полагая ϵ столь малой величиной, что $\cos \epsilon$ можно заменить единицей, а $\sin \epsilon$ — аргументом ϵ , и принимая во внимание равенство $2d \sin \theta_B = \lambda$, получаем для разности фаз

$$2\pi + \frac{4\pi d}{\lambda} \cos \theta_B \epsilon = 2\pi + \delta. \quad (6.52)$$

Здесь $\delta = (4\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon$. Разность фаз, равная 2π , равносильна полному совпадению фаз. Поэтому возмущения, приходящие в точку P от последовательных плоскостей, будут равны выражению (6.50), умноженному соответственно на 1, $\exp(-i\delta)$, $\exp(-2i\delta)$, ..., $\exp[-(p-1)i\delta]$, где p — число атомных слоев. Таким образом, полная амплитуда в точке P будет равна выражению (6.50), умноженному на сумму

$$1 + e^{-i\delta} + e^{-2i\delta} + \dots + e^{-(p-1)i\delta} = \frac{1 - e^{-pi\delta}}{1 - e^{-i\delta}}. \quad (6.53)$$

Интенсивность волны, рассеянной под углом $\theta_B + \epsilon$, будет пропорциональна произведению квадратов модулей выражений (6.50) и (6.53). Другими словами, мы имеем

$$\frac{\text{Интенсивность отраженной волны}}{\text{Интенсивность падающей волны}} = \left(\frac{N d \lambda |F| e^2 / mc^2}{4\pi \epsilon_0 \sin \theta} \right)^2 \times \frac{\sin^2 [p (2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]}{\sin^2 [(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]}. \quad (6.54)$$

Множитель

$$\frac{\sin^2 [p (2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]}{\sin^2 [(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]} \quad (6.55)$$

фигурирует в теории дифракционной решетки с p штрихами и в других аналогичных задачах теории дифракции. Он равен p^2 при $\epsilon = 0$, имеет узкий максимум и спадает до нуля при

$$p \frac{2\pi d}{\lambda} \cos \theta_B \epsilon = \pi, \quad \text{или} \quad \cos \theta_B \epsilon = \frac{\lambda}{2pd}. \quad (6.56)$$

Отсюда видно, что максимум тем уже, чем больше число p . Такое уширение брэгговских линий действительно наблюдается

при работе с кристаллами очень малых размеров. Оно гораздо больше, чем вызванное первичной экстинкцией, так что практически последний эффект полностью затушевывается.

Так как кристаллам различной толщины соответствуют различные значения ρ и, следовательно, различные значения высоты и ширины пиков, то использование этих величин для экспериментального определения коэффициента отражения оказывается нерациональным. Вместо этого измеряется площадь, ограниченная кривой зависимости интенсивности от угла ϵ . Эта площадь называется интегральной интенсивностью и определяется выражением

$$\frac{\text{Интегральная интенсивность отраженной волны}}{\text{Интенсивность падающей волны}} = \left(\frac{N d\lambda |F| e^2/mc^2}{4\pi\epsilon_0 \sin \theta_B} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 [p (2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]}{\sin^2 [(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]} d\epsilon. \quad (6.57)$$

Для вычисления входящего сюда интеграла заметим, что в той области, где подынтегральное выражение заметно отлично от нуля, знаменатель можно заменить на $[(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]^2$. Тогда получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 [p (2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]}{[(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B \epsilon]^2} d\epsilon = \frac{\rho}{(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \frac{\pi\rho}{(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B}, \quad (6.58)$$

откуда

$$\frac{\text{Интегральная интенсивность отраженной волны}}{\text{Интенсивность падающей волны}} = \left(\frac{N d\lambda |F| e^2/mc^2}{4\pi\epsilon_0 \sin \theta_B} \right)^2 \frac{\pi\rho}{(2\pi d/\lambda) \cos \theta_B}. \quad (6.59)$$

Из формулы (6.59) следует, что интегральная интенсивность отраженной волны пропорциональна числу отражающих плоскостей ρ . Однако мы упустили из виду одно обстоятельство. Если размеры кристалла невелики, то очевидно, что отражаться будет только излучение, падающее на него. Если обозначить площадь сечения кристалла плоскостью xy через A , то площадь сечения рассеянного пучка нормальной к нему плоскостью будет равна $A \sin \theta_B$. Поэтому полное количество рассеянного излучения будет пропорционально правой части формулы (6.59), умноженной на $A \sin \theta_B$. Обычно считают, что в эксперименте все это излу-

чение улавливается детектором. Поскольку произведение Ard равно объему кристалла, мы имеем

$$\frac{\text{Полное отраженное излучение}}{\text{Интенсивность падающей волны}} = \left(\frac{N d \lambda |F| e^2 / mc^2}{4\pi e_0} \right)^2 \frac{\pi \cdot (\text{объем}) / d}{(2\pi d / \lambda) \sin \theta_B \cos \theta_B} = \frac{N^2 \lambda^3 |F|^2 (e^2 / mc^2)^2}{(4\pi e_0)^2} \frac{1}{\sin 2\theta_B} \cdot (\text{объем}). \quad (6.60)$$

Формула (6.60) совпадает с результатом работы [25] для полной интегральной интенсивности отраженного излучения, коль скоро вектор напряженности электрического поля перпендикулярен плоскости падения. Если же вектор E лежит в указанной плоскости, то, как легко показать по аналогии с § 5, у амплитуды появится добавочный множитель $\cos 2\theta_B$, а в выражении для интенсивности — множитель $\cos^2 2\theta_B$. Наконец, если падающее излучение не поляризовано, то поправочный множитель будет иметь вид

$$\frac{1 + \cos^2 2\theta_B}{2}. \quad (6.61)$$

Этот множитель следует ввести в правую часть (6.60), чтобы получить окончательный результат.

Более подробное рассмотрение, проведенное, например, в монографии [13], показывает, что в большинстве случаев формула (6.60) для интенсивности отраженной волны применима не только к кристаллам малых размеров, но и к мозаичным структурам, состоящим из большого числа некогерентно рассеивающих малых областей. Таким образом, эта формула выражает интенсивность, измеряемую экспериментально. Особо отметим, что эта интенсивность пропорциональна квадрату структурного множителя $|F|^2$, определенного равенством (6.9). Отсюда видно, как можно экспериментально определить структурный множитель (точнее, его квадрат). При этом будут определены как раз те значения множителя F , которые используются для гармонического синтеза плотности заряда (см. § 2). Следует, однако, заметить, что в силу ряда обстоятельств в реальной ситуации задача сильно усложняется по сравнению с изложенным выше. Здесь мы лишь упомянем об этих усложняющих обстоятельствах. К некоторым из них мы вернемся позднее; все они обсуждаются в книге [13] и в других монографиях, посвященных дифракции рентгеновских лучей.

Первое осложнение состоит во влиянии теплового движения атомов на рассеяние рентгеновских лучей. Подробнее этот вопрос будет обсуждаться в следующей главе, после рассмотрения

природы теплового движения. Существуют два эффекта: уменьшение интенсивности брэгговского отражения на множитель, называемый фактором Дебая — Уоллера, и диффузное рассеяние, не ограниченное брэгговскими углами. Последнее оказывается весьма важным с точки зрения теплового движения. Другое усложняющее обстоятельство — это эффект поглощения или аномальной дисперсии излучения в кристалле. До сих пор мы не учитывали истинного поглощения в кристалле, но фактически оно отнюдь не мало, и его учет приводит к существенным поправкам. Очевидно, что если вследствие данной формы кристалла для некоторых брэгговских углов дифрагированный пучок проникает в кристалл глубже, чем для других, то в соответствующих направлениях поглощение будет сильнее и необходимо ввести поправку на этот эффект. Кроме того, вблизи полос поглощения в рентгеновской части спектра, где существенны эффекты аномальной дисперсии, показатель преломления уже не имеет того простого вида, который мы использовали, и это значительно влияет на отражение. Последний эффект был рассмотрен в работах [495, 496]¹⁾. Наконец, третье осложнение связано с комптоновским рассеянием, т. е. с рассеянием излучения, при котором электроны претерпевают отдачу. При этом поглощается часть энергии падающего фотона, что приводит к появлению рассеянного излучения с несколько большей длиной волны. Этот тип рассеяния необходимо учитывать при интерпретации опытных данных. Кроме того, как уже отмечалось в гл. 1, § 5, это рассеяние может дать нам ценную информацию относительно свойств атомов; в настоящей книге, однако, мы не будем на этом останавливаться.

Мы лишь упомянули об усложняющих эффектах, и это краткое изложение не сможет дать читателю полного представления о дифракции рентгеновских лучей. Последнее, однако, и не входит в задачу настоящей книги. Здесь были изложены лишь основные идеи, поскольку они тесно связаны как с теорией Друде — Лорентца, рассмотренной в двух предыдущих главах, так и с многими вопросами, подлежащими рассмотрению в дальнейшем. Читатель может убедиться, что практически вся теория, изложенная в этой главе, была развита до появления квантовой механики. Вместе с теорией Друде — Лорентца она составляла часть багажа физика-теоретика тех времен, когда квантовая механика только создавалась.

Следующий вопрос, который мы рассмотрим, — это упругие колебания кристаллической решетки, проявляющиеся в виде тепловых колебаний и связанные со многими свойствами твердых

¹⁾ См. библиографию в конце книги.

тел — оптическими свойствами, рассеянием электронов проводимости, рассеянием рентгеновских лучей и нейтронов и т. д. Теория этих колебаний была создана в начале нашего века и хорошо развита ко времени появления волновой механики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Friedrich W., Knipping P., Laue M., Sitzber. Math.-Phys. Kl. Bauer. Akad. Wiss., 303 (1912).
2. Laue M., Sitzber. Math.-Phys. Kl. Bauer. Akad. Wiss., 363 (1912).
3. Friedrich W., Knipping P., Laue M., Ann. d. Phys., 41, 971 (1913).
4. Bragg W. H., Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., A88, 428 (1913).
5. Bragg W. H., Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., A89, 246 (1913).
6. Bragg W. L., Proc. Cambr. Phil. Soc., 17, 43 (1913).
7. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 2, New York, 1965.
8. Bragg W. H., Phil. Trans. Roy. Soc., A215, 253 (1915).
9. Ewald P. P., Ann. d. Phys., 49, 1, 117 (1916).
10. Ewald P. P., Ann. d. Phys., 54, 519, 557 (1918).
11. Rayleigh, Phil. Mag., 34, 481 (1892).
12. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., A123, 537 (1929).
13. James R. W., The Optical Principles of the Diffraction of X-rays, London, 1948. (См. перевод: Р. Джеймс, Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, ИЛ, 1950.)
14. Havighurst R. J., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 11, 502, 507 (1925).
15. James R. W., Brindley G. W., Phil. Mag., 12, 81 (1931).
16. James R. W., Brindley G. W., Zs. Krist., 79, 470 (1931).
17. James R. W., Firth E. M., Proc. Roy. Soc., A117, 62 (1927).
18. James R. W., Waller I., Hartree D. R., Proc. Roy. Soc., A118, 334 (1928).
19. Hartree D. R., Phil. Mag., 46, 1091 (1923).
20. Hartree D. R., Phil. Mag., 50, 289 (1925).
21. Darwin C. G., Phil. Mag., 27, 315, 675 (1914).
22. Slater J. C., Rev. Mod. Phys., 30, 197 (1958).
23. James R. W., Solid State Phys., 15, 53 (1963).
24. Batterman B. W., Cole H., Rev. Mod. Phys., 36, 681 (1964).
25. Bragg W. L., James R. W., Bosanquet C. H., Phil. Mag., 41, 309 (1921).
26. Slater J. C., Frank N. H., Electromagnetism, New York, 1947.
- 27*. Ландсберг Г. С., Оптика, М.—Л., 1952.
- 28*. Жданов Г. С., Основы рентгеновского структурного анализа, М.—Л., 1940.
- 29*. Боровский И. Б., Физические основы рентгеноспектральных исследований, М., 1956.
- 30*. Джонс Г., Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах, изд-во «Мир», 1968.
- 31*. Калашников С. Г., Леонтович М. А., ЖЭТФ, 10, 749 (1940).
- 32*. Мак-Лахлан Н., Теория и приложения функций Матъё, ИЛ, 1953.
- 33*. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Теория поля, 4-е изд., М., 1962.
- 34*. Соколов А. А., Лоскутов Ю. М., Тернов И. М., Квантовая механика, 2-е изд., М., 1965.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

к § 2

Атомный фактор: [1191, 135—138, 1749, 2115—2126, 2225, 291, 2637, 2707, 3135, 3709, 3842].

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

§ 1. Теория колебаний кристаллической решетки по Дебаю и Борну — Карману

Достижения физики твердого тела в период около 1912 г. не сводились только к теории рассеяния рентгеновских лучей, рассмотренной в предыдущей главе. Большое число работ было посвящено также задаче о колебаниях кристаллической решетки. Интерес к ней был стимулирован экспериментальным открытием Камерлинг-Оннеса, который обнаружил, что при стремлении температуры к абсолютному нулю теплоемкость кристалла также стремится к нулю. Первое объяснение этого явления, не предусмотренного классической статистической механикой, дал Эйнштейн в 1907 г. [1]. Он показал, что, согласно квантовой теории, по которой энергия осциллятора может принимать только дискретные значения $nh\nu$ (где n — целое число), средняя энергия осциллятора при температуре T равна

$$E = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (7.1)$$

Здесь h — постоянная Планка, ν — частота осциллятора. Производная от этой функции по температуре, равная теплоемкости вещества, состоящего из таких осцилляторов, при абсолютном нуле обращается в нуль, что и было обнаружено на опыте. Однако, хотя полученная таким путем кривая теплоемкости близка к экспериментальной, количественного совпадения все же достигнуть не удалось.

Недостатки эйнштейновской теории теплоемкости были вскрыты в 1912 г. почти одновременно Дебаем [2] и Борном и Карманом [3-5]. Названные авторы приписали несовершенство теории одному и тому же источнику — предположению Эйнштейна о том, что все осцилляторы в кристалле обладают одинаковой частотой. При более подробном исследовании колебаний кристаллической решетки оказалось, что в действительности имеется распределение частот от самых низких до некоторого максимального значения. Следовательно, вместо того чтобы просто умножать энергию осциллятора на число независимых осцилляторов [как это было сделано при выводе формулы (7.1)], необходимо, приписывая осцилляторам различные частоты, про-

суммировать выражения типа (7.1) по всем осцилляторам. Теории Дебая и Борна — Кармана отличались друг от друга только допущениями относительно спектра частот осцилляторов, но это отличие не приводило к существенно различным результатам. Обе теории давали формулы, хорошо согласовавшиеся с опытом, установленным тем самым дефекты, имевшиеся в трактовке Эйнштейна.

Теория Дебая была проще, позволяя получать полезные результаты, и оказала огромное влияние на всю теорию твердого тела. Ее простота почти полностью отвлекла внимание физиков и химиков от теории Борна — Кармана, которая, будучи гораздо полнее и точнее, приводила тем не менее к аналогичным результатам. Лишь в последние годы, когда стало возможным экспериментальное изучение колебательных спектров твердых тел, стало ясно, что правильна именно теория Борна — Кармана, в то время как теория Дебая дает лишь полезное первое приближение. В связи с этим мы сосредоточим основное внимание на теории Борна — Кармана¹⁾.

Обе указанные теории исходят из того, что тепловые колебания твердого тела представляют собой суперпозицию упругих колебаний, аналогичных звуковым волнам. Рассматривая обычные механические колебания твердого тела, легко видеть, что в последнем могут образовываться стоячие звуковые волны. Длины волн должны быть такими, чтобы на длине образца укладывалось целое число полуволн. Подробное исследование таких колебаний очень сложно ввиду взаимодействия между продольными и поперечными волнами, распространяющимися в твердых телах с разными скоростями (причем продольные волны имеют большую скорость, чем поперечные). Однако общая ситуация довольно проста. Поскольку линейные размеры кристалла фиксированы, более высоким модам будут соответствовать большие числа полуволн, укладывающихся на длине кристалла, более короткие длины волн и более высокие частоты. Низким модам соответствуют звуковые частоты; в дальнейшем с повышением порядка мы быстро переходим к ультразвуковым волнам, лежащим вне области слышимости. Имея дело с идеальной непрерывной средой, мы получили бы все более и более высокие моды со все более короткими длинами волн и все большими частотами без какого-либо ограничения. Фактически, однако, дело обстоит иначе, в чем легко убедиться любым из двух указанных ниже способов.

¹⁾ Список литературы, посвященной колебаниям решетки, будет приведен в гл. 8, § 6. Наиболее видными фигурами в этой области были, по-видимому, Борн и Блэкман, который занялся этой проблемой в 30-х годах и внес большой вклад в ее решение.

Во-первых, при уменьшении длины волны в конце концов наступит момент, когда половина длины волны станет равной расстоянию между соседними атомами. При этом последние будут колебаться в противоположных фазах. Представление о более коротких волнах не имеет смысла, поскольку вещество состоит из атомов и при описании колебаний решетки можно говорить лишь о смещениях отдельных атомов. Полное число мод колебаний должно быть ограничено, поскольку в спектре колебаний не существует меньших длин волн. Иначе говоря, не может быть частот, превышающих некоторое максимальное значение, отвечающее случаю, когда половина длины волны равна межатомному рассеянию.

Во-вторых, твердое тело можно рассматривать как динамическую систему, в которой силы, действующие на атомы, пропорциональны их смещениям из положений равновесия, так что атомы совершают простое гармоническое движение. Как известно из теоретической механики, в этом случае можно ввести нормальные координаты — линейные комбинации смещений различных атомов, обладающие тем свойством, что уравнение движения для каждой нормальной координаты имеет тот же вид, что и для линейного осциллятора. Именно в этом смысле говорят, что рассматриваемая система подобна набору линейных осцилляторов. Из механики известно также, что число нормальных координат, которые можно ввести, точно равно числу степеней свободы системы. Под последним мы понимаем число координат, необходимых для описания положений всех атомов. Поскольку положение частицы определяется тремя координатами, на единицу объема должно приходиться $3N$ степеней свободы, где N — число атомов в единице объема. Таким образом, на единицу объема будет приходиться $3N$ нормальных координат. Поскольку это число конечно, вполне естественно ожидать, что будет существовать некоторая максимальная частота или минимальная длина волны. Итак, мы приходим к тому же выводу, что и в предыдущем абзаце. Более внимательное исследование, выполненное Борном и Карманом, показало, что оба подхода в точности согласуются друг с другом.

В теории Борна — Кармана дается подробное рассмотрение этих $3N$ нормальных координат. В теории Дебая для распределения частот осцилляторов используется приближение, взятое из обычной акустики, а атомная природа вещества учитывается лишь тем, что число нормальных колебаний в единице объема принимается равным $3N$.

Мы уже упоминали, что эти теории колебаний кристаллической решетки появились в 1912 г. одновременно с открытием дифракции рентгеновских лучей. В ходе быстрого развития тео-

рии выяснилось влияние колебаний решетки на рассеяние рентгеновских лучей, что и привело к возможности экспериментального исследования этих колебаний рентгеновскими методами. В частности, Дебай [6] показал, что тепловые колебания должны сильно влиять на интенсивность отраженных рентгеновских лучей. Это влияние описывается так называемым фактором Дебая — Уоллера (Уоллер [7] занимался этими вопросами несколько позднее). Указанный эффект был обнаружен экспериментально в согласии с теорией. Подробнее мы рассмотрим его в § 3. В это же время Дебай [8, 9] и Бриллюэн [10, 11] предсказали совсем иной эффект — диффузионное рассеяние рентгеновских лучей колебаниями решетки, о котором мы уже упоминали в гл. 1, § 5. В то время это предсказание почти не привлекло внимания. Однако позднее, уже в последние годы, исследование этого типа рассеяния (не только рентгеновских лучей, но и нейтронов) привело к созданию экспериментальных методов изучения спектра упругих колебаний кристаллической решетки. Мы рассмотрим эти вопросы в § 4—6 и в гл. 8.

Изучение упругих колебаний решетки, разумеется, привело к исследованию теплоемкости; кроме того, была развита также теория теплового расширения и других явлений, относящихся к уравнению состояния твердого тела, т. е. к связи между давлением, температурой и объемом кристалла. Это было сделано Грюнайзеном [12], который исследовал изменение частот колебаний решетки при сжатии кристалла и таким путем определил зависимость внутренней энергии от объема. Отсюда с помощью термодинамических соотношений можно получить ряд сведений о поведении кристалла.

Теория колебаний решетки имеет много точек соприкосновения с современными исследованиями в области физики твердого тела. Во многих случаях оптическое поглощение или излучение связано не только с электронными переходами, но и с изменением колебательного состояния решетки. Изменение квантовых чисел решетки обычно интерпретируется как испускание и поглощение квантов колебательной энергии — фононов. Как было показано в гл. 1, § 5, рассеяние электронных волн колебаниями решетки дает основной вклад в электрическое сопротивление. Только что мы упомянули о влиянии колебаний решетки на рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов. Кроме того, как уже говорилось в настоящем параграфе, удельная теплоемкость и уравнение состояния твердого тела определяются в основном колебаниями решетки. Это лишь немногие примеры многочисленных применений рассматриваемой теории. В данной книге мы не будем останавливаться на подробностях теории теплоемкости и теплового расширения; элементарное изложение

этих вопросов можно найти в книге автора [13]¹⁾, а более полное — в книге Займана [14]. Другие приложения, о которых здесь упоминалось, будут рассмотрены в этой и последующих главах.

§ 2. Тепловые колебания кристалла

Основные черты теории колебаний решетки по Борну — Карману можно представить в очень простой форме. Будем исходить из классической механики и напишем ньютоновские уравнения движения для упругих колебаний атомов кристалла, действующих друг на друга с линейными возвращающими силами. Пусть каждая элементарная ячейка кристалла содержит g атомов и несмещенное положение равновесия s -го атома в i -й элементарной ячейке описывается радиусом-вектором $\mathbf{r}_s + \mathbf{R}_i$. Здесь \mathbf{r}_s — радиус-вектор атома относительно начала координат, выбранного внутри его элементарной ячейки, а \mathbf{R}_i — вектор, проведенный из общего начала координат в соответствующую точку i -й элементарной ячейки. Эти положения атомов предполагаются равновесными. Пусть теперь s -й атом в i -й ячейке смещается из положения равновесия на малый вектор $\mathbf{u}(s, i)$. При этом на каждый атом будет действовать сила, представляющая собой линейную комбинацию смещений всех атомов. Членами, нелинейными относительно смещений, в обычной линейной теории пренебрегают.

Итак, мы должны отразить тот факт, что каждая из трех компонент вектора силы, действующей на атом (s, i) , есть линейная комбинация трех компонент векторов смещения $\mathbf{u}(t, j)$ всех атомов кристалла. Это можно записать в виде

$$F_a(s, i) = \sum_{b, t, j} C_{ab}(s, t, \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) u_b(t, j). \quad (7.2)$$

Здесь индексы a и b принимают по три значения, соответствующих координатам x, y, z . Через $F_a(s, i)$ обозначена a -я компонента силы, действующей на s -й атом в элементарной ячейке с радиусом-вектором \mathbf{R}_i , а через $u_b(t, j)$ — b -я компонента смещения t -го атома в элементарной ячейке с радиусом-вектором \mathbf{R}_j . Коэффициент $C_{ab}(s, t, \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)$ в линейной теории зависит от выбора компонент a и b , от номера атомов в элементарных ячейках (индексы s и t) и от расстояния $\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$ между двумя элементарными ячейками. С другой стороны, ввиду периодичности кристалла коэффициенты C_{ab} не зависят от абсолютного положения каждой из элементарных ячеек. Силы (7.2) не предполагаются центральными, и на них не накладывается никаких

¹⁾ См. также [18, 19]. — Прим. ред.

других ограничений подобного типа. Между коэффициентами C существуют соотношения, определяемые точечной группой симметрии кристалла. Мы не будем здесь рассматривать эти соотношения подробнее; в большинстве случаев они оказываются очевидными.

Теперь можно написать второй закон Ньютона для движения атомов. Обозначая массу s -го атома в элементарной ячейке через m_s , имеем

$$m_s \frac{d^2 u_a(s, i)}{dt^2} = F_a(s, i) = \sum_{b, t, j} C_{ab}(s, t, \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) u_b(t, j). \quad (7.3)$$

Будем искать решение этих уравнений в виде упругих волн, в которых смещения имеют вид

$$u_a(s, i) = w_a(s) \exp [i(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i)]. \quad (7.4)$$

Здесь $w_a(s)$ и ω — искомые функции волнового вектора \mathbf{q} . Как правило, мы будем обозначать волновой вектор упругой волны через \mathbf{q} , оставляя символ \mathbf{k} для обозначения волнового вектора электронных и электромагнитных волн. Эти векторы принадлежат одному и тому же \mathbf{k} -пространству, и при одинаковых обозначениях в случае взаимодействия между упругими и электромагнитными волнами их невозможно было бы отличить друг от друга. При подстановке выражения (7.4) в уравнение (7.3) последнее принимает вид

$$-m_s \omega^2 w_a(s) = \sum_{b, t, v} C_{ab}(s, t, \mathbf{R}_v) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_v) w_b(t) \quad (7.5)$$

(здесь разность $\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$ заменена на \mathbf{R}_v). Мы получили систему $3g$ уравнений для $3g$ смещений g атомов элементарной ячейки. Это линейные однородные уравнения для постоянных $w_a(s)$, где индекс a принимает значения x, y, z , а s нумерует атомы элементарной ячейки, пробегая значения от 1 до g . Как известно, такая система уравнений имеет нетривиальное решение лишь в том случае, если ее определитель равен нулю. Это условие приводит к уравнению степени $3g$, определяющему ω^2 как функцию волнового вектора \mathbf{q} . Это уравнение аналогично секулярному уравнению квантовой механики, но ввиду конечного числа атомов в элементарной ячейке оно имеет конечный порядок. По этой причине, зная коэффициенты C , его можно точно решить с помощью электронных вычислительных машин. Определив частоту, найдем величины w , после чего можно будет определить и смещения атомов для $3g$ нормальных колебаний кристалла в зависимости от волнового вектора \mathbf{q} .

Заметим, что смещения (7.4) не изменяются при добавлении \mathbf{k} волновому вектору \mathbf{q} вектора обратной решетки \mathbf{K}_j , поскольку

произведение $K_j \cdot R_i$ равно целому числу, умноженному на 2π . Поэтому все возможные решения можно получить, ограничивая область изменения вектора q пределами первой зоны Бриллюэна. Иначе говоря, q можно рассматривать как приведенный волновой вектор. При таком выборе q квадрат частоты ω^2 можно рассматривать как периодическую функцию точки в k -пространстве, повторяющуюся в каждой элементарной ячейке последнего (подобно энергии в зонной теории). Пользуясь теми же приемами, что и в теории электронных энергетических зон, можно построить зависимость ω от q ; при этом получаются значения ω вдоль определенных прямых в k -пространстве (например, $[100]$ или $[111]$), проведенных из центра зоны Бриллюэна к ее краю. Мы получим $3g$ отдельных кривых, причем в некоторых точках будет иметь место вырождение в полной аналогии со случаем электронных зон.

В частности, оказывается, что для трех кривых, называемых акустическими ветвями, частота ω стремится к нулю при $q \rightarrow 0$. Название «акустическая ветвь» связано с тем, что в предельном случае длинных волн (малых q) получаются колебания звуковой частоты. Эти три моды при $q = 0$ вырождены, и каждая из них имеет нулевую частоту. Причина обращения частоты в нуль состоит в том, что случай $q = 0$ соответствует одинаковому смещению всех атомов кристалла вдоль любой из осей x , y , z , не вызывающему изменения энергии кристалла, поэтому квазиупругие силы, а следовательно, и резонансные частоты равны нулю. В кубическом кристалле при распространении волны в направлении $[100]$ при $q \neq 0$ вырождение частично снимается, и мы имеем одну продольную волну и двукратно вырожденную поперечную волну, в которой колебания могут происходить либо вдоль оси y , либо вдоль оси z . При рассмотрении волны в произвольном направлении вырождение снимается полностью, и колебания нельзя разделять на продольные и поперечные. В отличие от акустических ветвей частоты остальных $3g - 3$ мод никогда не обращаются в нуль, а лежат в инфракрасной области спектра, и эти ветви называются оптическими.

Если кристалл имеет конечные размеры, то, как и в случае энергетических зон, волны вида (7.4) должны удовлетворять определенным граничным условиям. Если выбрать периодические граничные условия, то в кристалле окажутся возможными лишь нормальные колебания с дискретными значениями q . Как и в случае энергетических зон, эти значения q равномерно распределены внутри зоны Бриллюэна и число их равно числу элементарных ячеек N в повторяющейся области кристалла. Таким образом, полное число нормальных колебаний равно $3Ng$ в согласии с тем, что было сказано в § 1 (напомним, что теперь число

атомов в повторяющейся области равно Ng). В теории теплоемкости каждому из этих нормальных колебаний сопоставляется идеальный линейный осциллятор, обладающий при высоких температурах средней энергией kT , где k — постоянная Больцмана, а T — абсолютная температура. Это приводит к теплоемкости, равной $3Ngk$, что совпадает с известным законом Дюлонга и Пти. При низких температурах для определения колебательной энергии каждого осциллятора следует пользоваться квантовой теорией; при этом средняя энергия осциллятора будет описываться формулой (7.1), где ν — частота осциллятора: Это приведет нас к теории теплоемкости, построенной Борном и Карманом.

Исследованию колебаний кристаллической решетки посвящена обширная литература. Однако большинство работ основано на весьма произвольных допущениях относительно коэффициентов $C_{ab}(s, t, \mathbf{R}_\nu)$. Вместе с тем последние фактически представляют собой независимые микроскопические упругие постоянные, удовлетворяющие, как уже упоминалось, определенным соотношениям, обусловленным симметрией кристалла. Строго говоря, этих констант бесконечно много. Однако есть основания полагать, что их величина быстро убывает до нуля при удалении двух рассматриваемых атомов друг от друга; поэтому практически необходимо знать лишь небольшое число констант. Экспериментальное определение последних проводится главным образом путем исследования теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей или неупругого рассеяния нейтронов; эти явления будут рассмотрены ниже. Макроскопические упругие постоянные можно определить как линейные комбинации коэффициентов C . Действительно, в предельном случае низких частот колебания решетки переходят в обычные звуковые колебания, которые можно описывать с помощью классической теории упругости. Многие исследователи пытались идти обратным путем, выражая коэффициенты C через макроскопические упругие постоянные и вводя их затем в уравнение (7.5) для определения частот колебаний. Это, однако, принципиально невозможно, поскольку число макроскопических упругих постоянных очень мало, а количество коэффициентов C теоретически бесконечно. Если отказаться от полностью априорных расчетов, то единственно правильный путь состоит, по-видимому, в экспериментальном определении коэффициентов C с помощью теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей или рассеяния нейтронов с последующим вычислением макроскопических упругих постоянных. Последнее позволило бы проверить правильность найденных значений. В тех случаях, когда такие вычисления были проделаны, они привели к удовлетворительному согласию с опытом.

Как уже упоминалось, в теории упругих колебаний предполагается наличие только линейных возвращающих сил. Фактически эти линейные выражения представляют собой, конечно, лишь первые члены в разложении сил по степеням смещений. Члены более высокого порядка описывают взаимодействие между различными волнами, вследствие которого последние уже не могут распространяться независимо. Другими словами, одна упругая волна может рассеиваться на другой. При этом возникает задача о брэгговском отражении одной упругой волны от другой. (Разумеется, любую из двух взаимодействующих волн можно рассматривать как претерпевающую отражение.) Это взаимное рассеяние тепловых волн играет важную роль в теории теплопроводности. Действительно, тепло распространяется в теле в виде упругих волн. Они рассеиваются другими тепловыми волнами, в результате чего и возникает тепловое сопротивление. Эта идея лежит в основе известной теории теплопроводности Пайерлса [15]. В применении к реальным кристаллам эта проблема еще не рассмотрена с должной полнотой. Более подробное изложение теории упругих колебаний можно найти в монографии Займана [14], где дается современная трактовка вопроса.

Этих сведений из теории тепловых колебаний решетки достаточно для понимания дальнейшего. Мы предполагаем теперь перейти к задаче о влиянии колебаний решетки на рассеяние рентгеновских лучей или электронов. При этом необходимо выяснить, как тепловые колебания создают волны диэлектрической проницаемости (в случае рентгеновских лучей) или электростатического потенциала (в случае электронов) и как при этом возникает брэгговское рассеяние рентгеновских лучей или электронных волн.

§ 3. Фактор Дебая — Уоллера

Как было показано в гл. 6, § 2, для определения условий брэгговского рассеяния в произвольном направлении необходимо разложить плотность заряда в кристалле по плоским волнам. В невозмущенном кристалле будут распространяться только волны, волновые векторы которых суть векторы обратной решетки \mathbf{K} ; при этом структурный множитель F [см. (6.9)] определяет амплитуду плоской волны с волновым вектором \mathbf{K} . Как было показано, взяв только одну из этих плоских волн, мы получим рассеянную волну, удовлетворяющую закону Брэгга. Последний гласит: при рассеянии электромагнитной волны с волновым вектором \mathbf{k} и угловой частотой ω на плоской волне плотности заряда с волновым вектором \mathbf{K} волновой вектор рассеянной волны составит $\mathbf{k} + \mathbf{K}$, а угловая частота ее будет равна начальной величине ω . Поскольку длина волнового вектора рентгеновских лу-

чей связана с частотой ω соотношением $\omega/|k| = c$ (c — скорость света), а рассеянная волна обладает угловой частотой ω при волновом векторе $k + K$, длины векторов $k + K$ и k должны быть одинаковы.

Если в кристалле происходят тепловые колебания, то атомы уже не будут находиться в прежних невозмущенных положениях и при разложении плотности заряда в ряд Фурье возникнут новые плоские волны. Как мы вскоре покажем, их волновые векторы могут быть любыми, но амплитуды будут малы (они пропорциональны амплитудам тепловых колебаний атомов). Таким образом, брэгговское рассеяние сможет происходить во всех направлениях, т. е. возникнет явление, называемое тепловым диффузным рассеянием. Поскольку диффузное рассеяние отнимает энергию у обычного брэгговского пучка, интенсивность последнего должна уменьшаться с повышением температуры. Это уменьшение интенсивности описывается фактором Дебая — Уоллера, упомянутым в § 1. В настоящем параграфе мы ограничимся вычислением этого фактора, отложив изучение теплового диффузного рассеяния как такового до следующего раздела.

Очевидно, нам предстоит модифицировать расчет, выполненный в гл. 6, § 2, заменяя прежние координаты атомов в выражении (6.9) для структурного множителя их измененными значениями. Последние получаются, если к равновесным координатам добавить смещения, рассмотренные в § 2. Для описания смещений, вызванных тепловыми колебаниями, здесь потребуется несколько больше обозначений, чем было использовано в § 2. Мы уже упоминали, что каждому значению q волнового вектора упругой волны соответствуют $3g$ нормальных колебаний, где g — число атомов в элементарной ячейке. Будем нумеровать нормальные колебания индексом l , пробегающим значения от 1 до $3g$, и волновым вектором q , так что частоту нормального колебания можно представить в виде $\omega(l, q)$. При описании смещений атомов мы будем пользоваться не экспонентами от комплексного аргумента, а вещественными функциями времени во избежание трудностей при вычислении квадратов смещений. При этом необходимо иметь в виду, что величина $w_a(s)$ в выражении (7.4), представляющая амплитуду a -й компоненты смещения s -го атома, будет, вообще говоря, комплексной, поскольку различные атомы элементарной ячейки колеблются не только с различными амплитудами, но и в разных фазах. Положим $w_a(s) = W_a(s) \exp[-i\alpha(s)]$, где $W_a(s)$ — вещественная величина, а α — фазовая постоянная. Тогда вещественная часть смещения (7.4) примет вид $W_a(s) \cos[\omega t - q \cdot R_i - \alpha(s)]$. Как и частота ω , величины $W_a(s)$ и $\alpha(s)$ зависят от l и q . Далее, удобно нормировать величины W_a и ввести свою амплитуду для каждой

плоской волны. Таким образом, положим

$$u(s, i) = \sum_{l, q} A(l, q) W(s, l, q) \cos[\omega(l, q)t - q \cdot R_i - \alpha(s, l, q)]. \quad (7.6)$$

Это выражение определяет вектор смещения $u(s, i)$ s -го атома в i -й элементарной ячейке. Суммирование по l и q производится для нормальных колебаний. Амплитуда $A(l, q)$ пока произвольна. В дальнейшем, однако, предполагая, что она соответствует тепловым колебаниям, находим среднее значение ее квадрата из термодинамических соображений. Величина $W(s, l, q)$ предполагается нормированной следующим образом:

$$\sum_{s, i} m_s |W(s, l, q)|^2 = 1. \quad (7.7)$$

Здесь суммирование проводится по всем атомам кристалла, m_s — масса s -го атома в элементарной ячейке, $|W(s, l, q)|^2$ — квадрат вектора W . Фаза $\alpha(s, l, q)$ условием нормировки не определяется; относительные фазы колебаний различных атомов однозначно находятся из решения уравнений движения (7.5), однако каждому нормальному колебанию можно приписать еще произвольную добавочную фазу.

Задача сводится теперь к вычислению суммы

$$\sum_{s, i} f_s \exp\{ik_1 \cdot [r_s + R_i + u(s, i)]\}, \quad (7.8)$$

где, как и прежде, вектор $r_s + R_i$ описывает невозмущенное положение s -го атома в элементарной ячейке, удаленной от начала координат на расстояние, равное длине вектора R_i , а $u(s, i)$ есть вектор смещения этого атома из положения равновесия при данном нормальном колебании. Повторяя рассуждения гл. 6, § 2, находим, что если все смещения $u(s, i)$ равны, то сумма (7.8) отлична от нуля только тогда, когда вектор k_1 равен одному из векторов обратной решетки K ; в последнем случае сумма будет равна произведению структурного множителя на число элементарных ячеек в основной области N . При учете колебаний, как уже упоминалось, сумма (7.8) будет отлична от нуля при любом значении вектора k_1 . Мы по-прежнему будем пользоваться периодическими граничными условиями, так что необходимо рассматривать только те значения k_1 , которые соответствуют волнам, периодически повторяющимся в каждой из основных областей.

Сумму (7.8) можно переписать в виде

$$\sum_{s, i} f_s \exp[ik_1 \cdot (r_s + R_i)] \prod_{l, q} \exp\{ik_1 \cdot \{A(l, q) W(s, l, q) \times \cos[\omega(l, q)t - q \cdot R_i - \alpha(s, l, q)]\}\}. \quad (7.9)$$

Рассмотрим один из сомножителей. Его можно записать в виде $\exp(iz \cos \varphi)$, где

$$\begin{aligned} z &= A(l, q) \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, q), \\ \varphi &= \omega(l, q)t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i - \alpha(s, l, q). \end{aligned} \quad (7.10)$$

Можно показать, что

$$e^{iz \cos \varphi} = J_0(z) + \sum_{n=1}^{\infty} i^n J_n(z) (e^{in\varphi} + e^{-in\varphi}). \quad (7.11)$$

Это равенство вытекает из известного интегрального представления для функции Бесселя n -го порядка

$$J_n(z) = \frac{(-1)^n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[i(z \cos \varphi + n\varphi)] d\varphi, \quad (7.12)$$

причем по определению

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z). \quad (7.13)$$

Представим каждый сомножитель в (7.9) в виде (7.11). Произведение первых слагаемых, $J_0(z)$, вносит в сумму вклад, равный постоянной величине, умноженной на экспоненту $\exp[i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_s + \mathbf{R}_i)]$. Остальные члены приводят к произведениям экспонент вида

$$\exp\{\pm in[\omega(l, q)t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i - \alpha(s, l, q)]\},$$

которые, будучи умножены на $\exp[i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_s + \mathbf{R}_i)]$, дают функции с волновыми векторами, отличными от \mathbf{k}_1 . Как будет показано в следующем параграфе, именно эти члены приводят к тепловому диффузному (бриллюэновскому) рассеянию; первые же члены $J_0(z)$ приводят к появлению фактора Дебая — Уоллера. Рассмотрим сначала только их. Очевидно, в окончательный результат войдет произведение

$$\prod_{l, q} J_0[A(l, q) \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, q)], \quad (7.14)$$

умноженное на структурный множитель (6.9). Как уже упоминалось, сумма по \mathbf{R}_i будет отлична от нуля только в том случае, если вектор \mathbf{k}_1 равен одному из векторов обратной решетки \mathbf{K} , что и будет предполагаться в дальнейшем.

Вычислим теперь фактор Дебая — Уоллера (7.14) для $\mathbf{k}_1 = \mathbf{K}$. При этом необходимо усреднить выражение (7.14) по равновесному статистическому ансамблю. Мы будем пользоваться

классической статистикой, в которой справедлив закон равномерного распределения и усреднение проводится без труда, а затем приведем и результат квантовомеханического расчета, необходимого в случае низких температур. В классической статистике величина $A(l, \mathbf{q})$ ведет себя как амплитуда классического осциллятора с частотой $\omega(l, \mathbf{q})$. Как известно, вероятность найти значение этой амплитуды в интервале dA определяется больцмановским множителем $\exp(-E/kT)$, где k — постоянная Больцмана (не путать с волновым вектором \mathbf{k} !), T — абсолютная температура, E — энергия осциллятора. Таким образом, прежде всего необходимо выразить E через амплитуду A . Для этой цели достаточно найти среднюю кинетическую энергию и удвоить ее, поскольку для линейного осциллятора средняя кинетическая энергия равна средней потенциальной. Вычислим скорость, дифференцируя вектор смещения (7.6) по времени, затем, используя ее, найдем кинетическую энергию и усредним ее по времени. При возведении суммы (7.6) в квадрат получится двойная сумма, в которую войдут произведения косинусоидальных множителей. Среднее по времени от квадрата косинуса равно $1/2$, а среднее от произведения двух косинусов равно нулю вследствие различия частот (или произвольных фаз). В результате получаем

Средняя энергия всего кристалла =

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{s, i, l, \mathbf{q}} \frac{1}{2} m_s A^2(l, \mathbf{q}) [\mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})]^2 \omega^2(l, \mathbf{q}) = \\
 &= \sum_{l, \mathbf{q}} \frac{1}{2} A^2(l, \mathbf{q}) \omega^2(l, \mathbf{q}). \quad (7.15)
 \end{aligned}$$

Здесь было использовано равенство (7.7). Таким образом, величину $1/2 \omega^2(l, \mathbf{q}) A^2(l, \mathbf{q})$ можно интерпретировать как энергию моды (l, \mathbf{q}) .

Теперь нужно определить вероятность нахождения величины A в интервале dA в условиях теплового равновесия. Вспомним, что в классической статистике равновеликим областям фазового пространства (т. е. пространства координат и импульсов частицы) соответствуют равные априорные вероятности. Для линейного осциллятора область фазового пространства, ограниченная линией постоянной энергии, представляет собой эллипс, площадь которого пропорциональна A^2 . Приращение площади между двумя линиями постоянной энергии, соответствующими A и $A + dA$, пропорционально $d(A^2)$, т. е. $A dA$. Согласно статистике Больцмана и выражению для энергии (7.15), вероятность нахождения системы в единице площади фазового пространства пропорциональна $\exp(-A^2 \omega^2 / 2kT)$. Таким образом,

вероятность найти амплитуду в интервале между A и $A + dA$ равна

$$\frac{A \exp(-A^2\omega^2/2kT) dA}{\int_0^{\infty} A \exp(-A^2\omega^2/2kT) dA}. \quad (7.16)$$

Теперь мы можем усреднить по A величину

$$J_0[A(l, \mathbf{q}) \mathbf{K} \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})],$$

входящую в произведение (7.14). Для этой цели умножим функцию Бесселя на вероятность, определяемую выражением (7.16), и проинтегрируем по A от нуля до бесконечности. Воспользуемся тождеством

$$\frac{\int_0^{\infty} A \exp(-aA^2) J_0(bA) dA}{\int_0^{\infty} A \exp(-aA^2) dA} = \exp\left(-\frac{b^2}{4a}\right), \quad (7.17)$$

которое нетрудно доказать, разлагая функцию Бесселя в ряд и интегрируя почленно. Таким образом получим для среднего значения функции Бесселя $J_0[A(l, \mathbf{q}) \mathbf{K} \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})]$ величину

$$\exp\left\{-\frac{[\mathbf{K} \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})]^2 kT}{2\omega^2(l, \mathbf{q})}\right\}. \quad (7.18)$$

Все выражение (7.14) представляет собой произведение величин (7.18) со всеми значениями l и \mathbf{q} . Следовательно, фактор Дебая — Уоллера (7.14) можно записать в виде $\exp(-M_s)$, где

$$M_s = \sum_{l, \mathbf{q}} [\mathbf{K} \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})]^2 \frac{kT}{2\omega^2(l, \mathbf{q})}. \quad (7.19)$$

Эту величину можно выразить через средний квадрат смещения s -го атома в направлении вектора \mathbf{K} . Для этого вспомним, что средняя энергия моды (l, \mathbf{q}) , равная $1/2\omega^2(l, \mathbf{q})[A^2(l, \mathbf{q})]_{\text{ср}}$, в силу закона равнораспределения равна kT . Поэтому можно переписать (7.19) в виде

$$M_s = \frac{1}{4} \sum_{l, \mathbf{q}} [\mathbf{K} \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})]^2 [A^2(l, \mathbf{q})]_{\text{ср}}. \quad (7.20)$$

Возводя выражение (7.6) в квадрат и усредняя по времени, можно найти средний квадрат любой компоненты смещения s -го атома

$$[u_p^2(s, i)]_{\text{ср}} = \frac{1}{2} \sum_{l, \mathbf{q}} [W_p(s, l, \mathbf{q})]^2 [A^2(l, \mathbf{q})]_{\text{ср}}. \quad (7.21)$$

Таким образом, окончательно можно переписать (7.20) в виде

$$M_s = \frac{1}{2} [u_K^2(s, i)]_{\text{ср}} |\mathbf{K}|^2 = 8\pi^2 [u_K^2(s, i)]_{\text{ср}} \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}, \quad (7.22)$$

где u_K — компонента смещения вдоль вектора \mathbf{K} ; здесь использовано соотношение (6.8), $|\mathbf{K}| = (4\pi \sin \theta)/\lambda$.

Этим завершается простой и строгий вывод формулы Дебая — Уоллера для температурного фактора в случае классической статистики; мы в сущности воспроизвели здесь рассуждения Уоллера, содержащиеся в его диссертации. Из приведенного вывода следует, что в выражение для структурного множителя кристалла вместо атомного фактора f_s , фигурировавшего в отсутствие тепловых колебаний, необходимо подставить произведение f_s на фактор Дебая — Уоллера $\exp(-M_s)$. Интенсивность рассеянной волны пропорциональна квадрату структурного множителя; следовательно, в случае реального кристалла в нее входит фактор $\exp(-2M_s)$.

Наши рассуждения справедливы только при высоких температурах. В работах [16, 17] был выполнен аналогичный расчет для низких температур, когда необходимо пользоваться квантовой теорией. Прежде чем перейти к решению квантовомеханической задачи, резюмируем то, что мы сделали. Мы начали с суммы

$$\sum_{s, i} f_s \exp\{ik_1 \cdot [\mathbf{r}_s + \mathbf{R}_i + \mathbf{u}(s, i)]\}$$

и усреднили ее по времени. В сущности это свелось к тому, что было использовано разложение (7.11) и оставлены только члены типа (7.14), не зависящие от времени. Затем с помощью распределения Больцмана мы выполнили усреднение по различным амплитудам A . В квантовомеханическом случае следует поступать иначе, поскольку в силу соотношения неопределенностей невозможно локализовать смещение $\mathbf{u}(s, i)$ (s, i -го атома или записать его в виде синусоидальной функции времени. Вместо этого мы должны предположить, что осциллятор находится в определенном стационарном состоянии, и найти среднее значение интересующей нас величины (в данном случае $\exp[ik_1 \cdot \mathbf{u}(s, i)]$) в указанном стационарном состоянии. Для этого надо знать волновую функцию названного состояния; в данном случае она известна, так как мы имеем дело с линейными осцилляторами.

Вычислив среднее, предположим, что вероятность нахождения системы в данном стационарном состоянии пропорциональна $\exp(-E/kT)$, где E — соответствующее собственное значение энергии. По этому распределению необходимо произвести статистическое усреднение. Отт [16] при помощи изящного метода показал, что двукратное усреднение — квантовомеханическое и статистическое — можно объединить в математически единый процесс; таким путем он сумел вычислить интересующую нас величину в общем случае (хотя и не произвел всех указанных здесь операций). Борн и Саргинсон [17] выполнили эквивалентный расчет другим способом. Их вычисления показали, что формула (7.22) справедлива для всех температур, если под $[\mu_K^2(s, t)]_{\text{ср}}$ понимать величину, полученную с помощью квантовой механики и учитывающую нулевые колебания. Что касается формулы (7.19), то она, разумеется, применима лишь при высоких температурах.

§ 4. Тепловое диффузное, или бриллюэновское рассеяние рентгеновских лучей

Мы вычислили температурный фактор Дебая — Уоллера, описывающий уменьшение интенсивности рассеяния рентгеновских лучей под действием тепловых колебаний решетки. Напомним, что здесь речь идет о рассеянии, существующем и в отсутствие теплового движения. Кроме того, представляет интерес также тепловое диффузное рассеяние. Представляя все сомножители в выражении (7.9) в виде (7.11), получим в конечном счете ряд по степеням амплитуды тепловых колебаний $A(i, \mathbf{q})$. Член наименьшего порядка (после постоянного члена) соответствует значению $n=1$ в формуле (7.11), поскольку разложение функции Бесселя $J_n(z)$ в степенной ряд начинается с z^n . В элементарной теории теплового диффузного рассеяния используется только этот член низшего порядка (предполагается, что члены более высокого порядка существенны лишь при очень высоких температурах). При этом во всем произведении сохраняются лишь те члены, которые получаются, если в одном из сомножителей взять слагаемое с $n=1$, а в остальных — с $n=0$. При перемножении двух или более сомножителей с $n=1$ получаются выражения, пропорциональные произведению амплитуд двух или более акустических волн. Ими можно пренебречь, поскольку мы сохраняем только первые степени отдельных амплитуд A . Другими словами, мы ограничиваемся строго линейной теорией, пренебрегая всеми степенями амплитуд выше первой. Заметим, однако, что члены более высокого порядка по A , описывающие испускание или поглощение более чем одного фотона, в

реальной ситуации играют значительную роль; они рассматривались и теоретически.

Посмотрим теперь, какая величина получается для произведения в (7.9). Согласно (7.11), главный член в каждой из экспонент равен $J_0(z)$ и при малых z близок к единице. Строго говоря, он несколько меньше единицы, в результате чего произведение всех таких сомножителей, представляющее собой фактор Дебая — Уоллера вида (7.14), оказывается равным $\exp(-M_s)$, а не единице. Каждая отдельная функция $J_0(z)$, однако, очень близка к единице. Аналогично каждый член с $n = 1$ в (7.11) приближенно равен

$$iA(l, \mathbf{q}) \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q}) (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}), \quad (7.23)$$

где фаза φ определяется равенством (7.10) (не путать множитель $i = \sqrt{-1}$ перед $A(l, \mathbf{q})$ с индексом суммирования $i!$). В принятом приближении можно записать выражение (7.8) в виде

$$\sum_{s, i} f_s \exp[i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_s + \mathbf{R}_i)] \exp(-M_s) \left(1 + \sum_{l, \mathbf{q}} iA(l, \mathbf{q}) \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q}) \times \right. \\ \times \{ \exp(i[\omega(l, \mathbf{q})t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i - \alpha(s, l, \mathbf{q})]) + \\ \left. + \exp(-i[\omega(l, \mathbf{q})t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i - \alpha(s, l, \mathbf{q})]) \} \right). \quad (7.24)$$

Возьмем один из членов суммы по l, \mathbf{q} . Он состоит из амплитуды $A(l, \mathbf{q}) \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})$ и экспоненциального множителя $\exp\{\pm i[\omega(l, \mathbf{q})t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i - \alpha(s, l, \mathbf{q})]\}$, который затем умножается на $\exp[i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_s + \mathbf{R}_i)]$. Произведение этих экспонент зависит от R_i , как $\exp[i(\mathbf{k}_1 \mp \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_i]$. При суммировании этого выражения по i результат отличен от нуля лишь при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{K}_j \pm \mathbf{q}$, где \mathbf{K}_j — один из векторов обратной решетки. Поскольку векторы \mathbf{q} могут заполнять всю зону Бриллюэна, волновые векторы результирующих волн плотности заряда, или показателя преломления, могут принимать все возможные значения, что и приводит к диффузному рассеянию. В принципе это возможно для любого вектора в пространстве \mathbf{k}_1 ; фактически, однако, легко убедиться, что интенсивность диффузного рассеяния резко возрастает вблизи узлов обратной решетки.

Причина этого состоит в том, что амплитуда волны плотности заряда (а следовательно, и амплитуда рассеянных рентгеновских лучей), как мы видим, пропорциональна $A(l, \mathbf{q}) \times \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})$. Интенсивность будет пропорциональна квадрату этой величины. Но, согласно (7.15), соответствующая этому члену средняя энергия равна $\frac{1}{2}A^2(l, \mathbf{q})\omega^2(l, \mathbf{q})$. В той области температур, где применима классическая статистика, эта энергия равна kT . Следовательно, среднее значение величины $A^2(l, \mathbf{q})$ равно $2kT/\omega^2(l, \mathbf{q})$; оно стремится к бесконечности, когда ча-

стога приближается к нулю. Для акустических ветвей спектра колебаний решетки частота стремится к нулю, когда стремится к нулю волновой вектор q или когда волновой вектор волны плотности заряда приближается к K_j — одному из векторов обратной решетки. Следовательно, вблизи этих значений волнового вектора интенсивность рассеяния неограниченно возрастает, что позволяет исследовать указанные ветви спектра. Напротив, вклад в диффузное рассеяние от оптических ветвей, которым отвечают гораздо большие частоты, не имеет таких же максимумов вблизи узлов обратной решетки; он распределен в пространстве волновых векторов более равномерно.

Мы выяснили общий характер теплового диффузного рассеяния. Полезно указать, как можно использовать это явление для изучения колебательного спектра решетки¹⁾. Используя монокроматический пучок рентгеновских лучей, можно наблюдать рассеяние в тех направлениях, для которых в случае невозмущенного кристалла брэгговского рассеяния быть не должно. Это рассеяние вызвано плоской волной плотности заряда, длина которой связана с углом рассеяния законом Брэггов. Следовательно, интенсивность рассеянной волны дает информацию именно о данной конкретной тепловой волне. Как мы видели, эта интенсивность пропорциональна $2kT/\omega^2(l, q)$. Таким образом, измеряя интенсивность рассеянной волны, можно найти частоту волны, волновой вектор которой мы уже определили по углу рассеяния. Очевидно, что этот метод не так прост, каким кажется с первого взгляда, поскольку рассеяние происходит не только на колебаниях трех акустических ветвей, но и на оптических колебаниях. Поэтому для тех кристаллов, у которых элементарная ячейка содержит более одного атома, необходимо принимать специальные меры для разделения вкладов, вносимых в рассеяние различными ветвями спектра.

В тех случаях, когда такие измерения проводились, они позволили найти значения ряда упругих постоянных $C_{ab}(s, l, \mathbf{R}_v)$, введенных в § 2 данной главы. Затем при помощи уравнения (7.5) были найдены частоты нормальных колебаний для любых волновых векторов. Отсюда можно известным способом вычислить колебательную теплоемкость твердого тела; в тех случаях, когда такие расчеты были выполнены, они привели к хорошему согласию с опытом. Следует отметить, что, помимо этого, зная частоты колебаний, можно было бы вычислить и фактор Дебая — Уоллера. Такой расчет, сопровождаемый сравнением с опытом, был бы ценным дополнением к существующим экспериментальным методам.

¹⁾ Литература по этому вопросу будет указана в гл. 8, § 1.

§ 5. Условия Брэгга для бриллюэновского рассеяния

В предыдущем параграфе было показано, что тепловое колебание с волновым вектором \mathbf{q} приводит к появлению в выражении для плотности заряда экспоненциального члена с волновым вектором $\mathbf{K} \pm \mathbf{q}$, где \mathbf{K} — один из векторов обратной решетки. Там, однако был рассмотрен не самый общий случай, поскольку, как следует из (7.24), указанный экспоненциальный член содержит также величину $\pm \omega$, где ω — угловая частота звуковой волны с волновым вектором \mathbf{q} . Рассмотрим теперь более общий случай и покажем, что, как было отмечено в гл. 1, § 5, наличие звуковой волны с угловой частотой ω вызывает сдвиг частоты рассеянных рентгеновских или световых лучей.

Вернемся к гл. 6, § 4 и 5, где рассматривалось рассеяние световой волны синусоидальным возмущением диэлектрической проницаемости. Внесем в проведенные там рассуждения следующее изменение: вместо диэлектрической проницаемости, зависящей только от координаты [см. (6.13)], будем рассматривать величину $1/\kappa_e$, равную

$$\frac{1}{\kappa_e} = 1 + \omega \{ \exp [i(\omega_1 t - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})] + \exp [-i(\omega_1 t - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})] \}. \quad (7.25)$$

Поскольку волны диэлектрической проницаемости рассеивают независимо друг от друга, мы здесь ограничились для простоты только одной синусоидальной волной. Амплитуда ω определяется малой амплитудой колебаний решетки $A(t, \mathbf{q})$, величина ω_1 есть та же угловая частота которая выше обозначалась через ω , а волновой вектор \mathbf{k}_1 имеет тот же смысл, что и раньше. Мы не будем здесь вновь решать всю задачу, как в гл. 6, § 4 и 5. (Это легко было бы сделать, но мы не получили бы ничего нового.) Вместо этого обратимся сразу к случаю, описываемому уравнениями (6.27), когда угол рассеяния близок к брэгговскому, и нужно рассматривать лишь одну рассеянную волну. Кроме того, с самого начала ограничимся случаем, когда вектор \mathbf{D} перпендикулярен плоскости чертежа (см. фиг. 6.1 или 7.1).

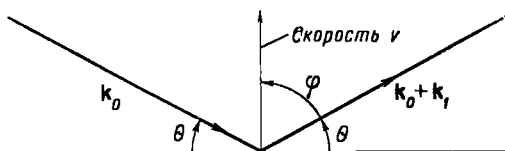
Вместо ряда (6.10) рассмотрим теперь только одну падающую волну с угловой частотой ω_0 и волновым вектором \mathbf{k}_0 и одну рассеянную волну с угловой частотой $\omega_0 + \omega_1$ и волновым вектором $\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1$; в дальнейшем будет показано, что суперпозиция этих двух волн дает приемлемое решение задачи. Таким образом, вместо (6.10) имеем

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}(0) \exp [i(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})] + \mathbf{D}(k_1) \exp \{ i[(\omega_0 + \omega_1)t - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}] \}. \quad (7.26)$$

Далее мы поступим так же, как и при выводе соотношения (6.18), и для определения напряженности электрического поля перемножим равенства (7.25) и (7.26). Получим

$$\epsilon_0 \mathbf{E} = \frac{1}{\chi_e} \mathbf{D} = [\mathbf{D}(0) + \omega \mathbf{D}(\mathbf{k}_1)] \exp [i(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})] + \\ + [\mathbf{D}(\mathbf{k}_1) + \omega \mathbf{D}(0)] \exp \{i[(\omega_0 + \omega_1)t - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}]\}. \quad (7.27)$$

При выводе этого соотношения были отброшены слагаемые с экспонентами, отличными от выписанных здесь, поскольку, как показывает дальнейшее исследование, при углах, близких к



Фиг. 7.1. Схема брэгговского рассеяния движущимся фронтом ультразвуковой волны. В результате рассеяния возникает доплеровский сдвиг частоты рассеянного излучения.

брэгговскому, соответствующие амплитуды малы и ими можно пренебречь. Так, в частности, мы опустили член с экспонентой

$$\exp \{i[(\omega_0 + 2\omega_1)t - (\mathbf{k}_0 + 2\mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}]\}.$$

В рассматриваемом случае $\text{div } \mathbf{E} = 0$, и по аналогии с (6.19) из уравнений Максвелла мы получаем $\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \partial^2 \mathbf{D} / \partial t^2$. Подставим сюда выражения для векторов \mathbf{E} и \mathbf{D} (7.26) и (7.27) и поступим так же, как и при выводе уравнений (6.27). Получим

$$\left(k_0^2 - \frac{\omega_0^2}{c^2} \right) \mathbf{D}(0) + \omega k_0^2 \mathbf{D}(\mathbf{k}_1) = 0, \quad (7.28) \\ \omega (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1)^2 \mathbf{D}(0) + \left[(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1)^2 - \frac{(\omega_0 + \omega_1)^2}{c^2} \right] \mathbf{D}(\mathbf{k}_1) = 0.$$

Эти уравнения отличаются от (6.27) лишь тем, что вместо ω^2 во втором уравнении стоит $(\omega_0 + \omega_1)^2$, и еще тем, что в рассматриваемом простом случае мы положили $(\chi_e)_{\text{ср}} = 1$ (эта аппроксимация носит тривиальный характер).

Теперь, повторяя те же рассуждения, что и в случае уравнений (6.28) и (6.29), можно показать, что брэгговское отражение будет происходить в узком интервале углов вблизи значения, определяемого из условий обращения в нуль диагональных

матричных элементов в (7.28). Эти условия имеют вид

$$\mathbf{k}_0^2 = \frac{\omega_0^2}{c^2}, \quad (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1)^2 = \frac{(\omega_0 + \omega_1)^2}{c^2}. \quad (7.29)$$

Равенства (7.29) подтверждают, что дело не только в наличии двух плоских волн в выражении (7.26). Последнее будет удовлетворять волновому уравнению, если только частоты и волновые векторы обеих волн будут должным образом связаны друг с другом. Оценка порядков входящих сюда величин показывает, что для оптических и тем более рентгеновских частот частота звуковой волны ω_1 , лежащая в ультразвуковом или инфракрасном диапазоне, очень мала по сравнению с ω_0 . Соответственно отклонение от обычного закона Вульфа — Брэгга незначительно. Как легко убедиться, здесь остаются в силе изложенные в гл. 6, § 5 рассуждения относительно затухания, появления запрещенной зоны в спектре частот распространяющихся волн вблизи брэгговских углов и т. д. Другими словами, единственное существенное следствие того факта, что звуковая волна движется, состоит в очень малом сдвиге частоты, связанном с поглощением фона рассеянной электромагнитной волной. Другой случай, когда фон испускается, соответствует изменению знака \mathbf{k}_1 в выражении (7.27).

Теперь можно установить связь с содержанием гл. 1, § 1. Мы исходим из представления рассеиваемой волны в виде вещественной части от экспоненты $\exp[i(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})]$; в классическом брэгговском случае это рентгеновская волна, в случае бриллюэновского рассеяния это может быть электромагнитная волна любой частоты. Затем мы рассматривали рассеивающую волну, которую можно записать как вещественную часть экспоненты $\exp[i(\omega_1 t - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})]$. В случае брэгговского рассеяния синусоидальной компонентой стационарной электронной плотности частота ω_1 равна нулю, а \mathbf{k}_1 есть волновой вектор рассматриваемой фурье-компоненты плотности заряда. При бриллюэновском рассеянии, однако, ω_1 представляет собой угловую частоту рассматриваемой звуковой волны, а $\mathbf{k}_1 = \mathbf{q} + \mathbf{K}$, где \mathbf{q} и \mathbf{K} — соответственно волновой вектор звуковой волны и один из векторов обратной решетки (последний, в частности, может быть равен нулю). В этом случае рассеянная волна описывается вещественной частью экспоненты $\exp\{i[(\omega_0 \pm \omega_1)t - (\mathbf{k}_0 \pm \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}]\}$; амплитуда волны пропорциональна интенсивности взаимодействия падающей и рассеивающей волн. В случае рентгеновских лучей при стационарной электронной плотности рассеянная волна характеризуется угловой частотой ω_0 (поскольку $\omega_1 = 0$) и представляет собой одну из обычных когерентно рассеянных волн, с которыми мы имеем дело при дифракции рентгеновских лучей.

Чтобы рассеянная волна имела ту же угловую частоту ω_0 , что и падающая, необходимо совпадение величин их волновых векторов, $\mathbf{k}_0 \pm \mathbf{k}_1$ и \mathbf{k}_0 . Как мы уже видели, это условие приводит к формуле Вульфа — Брэгга.

В более общем случае $\omega_1 \neq 0$ и синусоидальное возмущение, ответственное за рассеяние, изображается не застывшей картиной, а распространяющейся волной. При этом, однако, все равно необходимо выбирать вектор $\mathbf{k}_0 \pm \mathbf{k}_1$ так, чтобы соответствующая волна характеризовалась должной угловой частотой $\omega_0 \pm \omega_1$. Частоты рассеянной и падающей волн несколько различны; мы уже упоминали, что это можно интерпретировать как эффект Допплера, поскольку отражение происходит не от покоящегося, а от движущегося набора волн. Таким образом, если рассеивающие волны распространяются вверх (см. фиг. 7.1), то можно считать, что рассеянная волна испускается их изображением, движущимся вверх с удвоенной скоростью. Соответственно частота испускаемой волны оказывается больше истинной. Напомним, что если источник движется со скоростью v и испускает излучение, частота которого в системе отсчета, связанной с источником, равна ω_0 , то, согласно теории эффекта Допплера, кажущаяся частота, наблюдаемая в направлении, образующем со скоростью источника угол φ , равна

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{v}{c} \cos \varphi \right), \quad (7.30)$$

где c — скорость света. В рассматриваемом случае наблюдение ведется в направлении вектора $\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}_1$ (см. фиг. 7.1), так что $\cos \varphi = \sin \theta$. Скорость рассеивающей волны равна $\omega_1/|\mathbf{k}_1|$, а скорость v изображения, излучающего рассеянную волну, вдвое больше. Скорость света есть $c = \omega_0/|\mathbf{k}_0|$. Подставляя эти значения в (7.30) и используя формулу Вульфа — Брэгга $\lambda = 2d \sin \theta$, находим, что наблюдаемая частота рассеянной волны должна быть равна $\omega_0 + \omega_1$. Это согласуется с нашим общим утверждением относительно условий рассеяния. Иначе говоря, интерпретация сдвига частоты в терминах эффекта Допплера оказывается оправданной.

Имеется еще одна возможная интерпретация процесса рассеяния. Будем по-прежнему рассматривать рассеяние электромагнитных волн — рентгеновских или световых — звуковой волной, и пусть $\mathbf{k}_1 = \mathbf{q}$. Напомним квантовую трактовку световой волны: излучение состоит из фотонов с энергией $\hbar\nu_0 = \hbar\omega_0$ и импульсом $\hbar/\lambda = \hbar k_0$, где λ — длина волны. Если в процессе рассеяния угловая частота ω_0 заменяется на $\omega_0 + \omega_1$, а волновой вектор \mathbf{k}_0 — на $\mathbf{k}_0 + \mathbf{q}$, то мы должны считать, что энергия и импульс фотона увеличиваются на $\hbar\omega_1$ и $\hbar\mathbf{q}$. Но звуковые колебания

тоже квантуются, и квант звука, фонон, обладает энергией $\hbar\omega_1$ и импульсом $\hbar\mathbf{q}$. Упомянутая выше другая интерпретация состоит в том, что процесс рассеяния рассматривается как поглощение фотона с энергией $\hbar\omega_0$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}_0$ и рождение фотона с энергией $\hbar(\omega_0 + \omega_1)$ и импульсом $\hbar(\mathbf{k}_0 + \mathbf{q})$; при этом сохранение энергии и импульса обеспечивается благодаря поглощению фонона с энергией $\hbar\omega_1$ и импульсом $\hbar\mathbf{q}$. Аналогично в процессе рассеяния с конечной частотой $\omega_0 - \omega_1$ и конечным волновым вектором $\mathbf{k}_0 - \mathbf{q}$ испускается фонон с энергией $\hbar\omega_1$ и импульсом $\hbar\mathbf{q}$.

Рассеяние обладает еще одной особенностью: волновой вектор \mathbf{k}_1 может быть равен не только \mathbf{q} , но и $\mathbf{q} + \mathbf{K}$, где \mathbf{K} — вектор обратной решетки. Случаи, когда $\mathbf{K} \neq 0$, называются процессами переброса; они играют важную роль в теории электро- и теплопроводности. Процессы переброса представляют собой некий гибрид обычного брэгговского рассеяния и теплового диффузного рассеяния: изменение квазиимпульса рассеянной волны здесь частично компенсируется квазиимпульсом фонона $\hbar\mathbf{q}$, а частично — квазиимпульсом $\hbar\mathbf{K}$, переданным решетке.

Итак, мы установили общие закономерности рассеяния одной волны (например, световой или рентгеновской) на другой (например, звуковой). В наиболее интересных случаях имеется много рассеивающих волн; так, обычное брэгговское рассеяние обусловлено всеми фурье-компонентами плотности заряда; в случае рассеяния на тепловых колебаниях, или теплового диффузного рассеяния, мы имеем очень большое число упругих волн. Для корректной постановки задачи требуется некий эквивалент динамической теории рассеяния рентгеновских лучей; следует принять во внимание многократное рассеяние различными упругими волнами. Однако при слабом взаимодействии процессы рассеяния различными волнами можно рассматривать независимо друг от друга. Обычно именно так с хорошим приближением можно поступать в случае рассеяния рентгеновских лучей.

§ 6. Рассеяние электронов и нейтронов тепловыми колебаниями решетки

Из наших общих рассуждений должно быть ясно, что основные закономерности рассеяния электронов тепловыми колебаниями в сущности те же, что и в случае рентгеновских лучей. Различие состоит лишь в том, что теперь рассеяние обусловлено не волнами плотности, а синусоидальными волнами эффективной потенциальной энергии, возникающими вследствие тепловых колебаний (см. гл. 2, § 3). С хорошей точностью потенциальную

энергию электрона в кристалле можно аппроксимировать суммой потенциальных энергий его в полях отдельных атомов. В том же приближении можно построить теорию рассеяния, вполне аналогичную изложенной в предыдущем параграфе. Нужно лишь подставить в выражение для атомного фактора f_a фурье-компоненты не плотности заряда, а потенциальной энергии электрона в данном атоме. Как было отмечено в гл. 2, § 3, условия применимости этого приближения многократно обсуждались; в результате было установлено, что, хотя точность приближения невелика, качественно оно оправдано. Важность задачи о рассеянии электронов тепловыми колебаниями решетки связана главным образом не с дифракцией электронов, а с тем, что это рассеяние, как было показано в гл. 1, составляет основную причину электрического сопротивления вещества.

Рассеяние нейтронов тепловыми колебаниями решетки в одном отношении резко отличается от рассеяния рентгеновских лучей или электронов; это связано с большой массой нейтронов. Как уже неоднократно указывалось, во всех случаях волна при рассеянии изменяет свою частоту, если она рассеивается волной, синусоидально осциллирующей во времени. Так, например, обстоит дело при рассеянии на тепловых колебаниях решетки. Однако в случае рентгеновских лучей частота звуковых колебаний так мала, что изменение частоты пренебрежимо мало. В случае рассеяния электронов изменение энергии уже не столь незначительно, но все же мало по сравнению с полной энергией электрона. Как подчеркивалось в гл. 1, § 5, это обстоятельство существенно, ибо именно благодаря ему часть энергии, приобретенной электроном во внешнем электрическом поле, переходит в колебательную энергию решетки (рассеяние электронов на колебаниях решетки сопровождается испусканием фонона). Другими словами, это есть механизм возникновения джоулева тепла в проводнике.

Напротив, в случае рассеяния нейтронов с длиной волны порядка межатомных расстояний энергия нейтрона сравнима с тепловой. Соответственно энергия тепловых колебаний $\hbar\omega$ оказывается сравнимой с энергией нейтрона, а в некоторых случаях даже больше ее. Поэтому значения энергии нейтрона до и после рассеяния могут сильно отличаться друг от друга. Этот факт используется при изучении колебаний решетки с помощью неупругого рассеяния нейтронов. При этом применяются очень медленные нейтроны, соответствующие очень малому значению частоты ω_0 . Рассеиваясь на тепловых колебаниях решетки, они не могут создавать тепловых фононов, ибо их начальная энергия слишком мала. Вместо этого они поглощают фононы, приобретая энергию отдачи, причем последняя оказывается гораздо

больше начальной энергии. Затем измеряются волновые векторы нейтронов отдачи. По своему практическому воплощению этот опыт очень отличается от исследования теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Однако принцип его в сущности тот же самый. Мы рассмотрим этот метод подробнее в следующей главе, где будут также сообщены сведения о колебательных спектрах твердых тел.

ЛИТЕРАТУРА

1. Einstein A., Ann. d. Phys., **22**, 180 (1907). (См. перевод: А. Эйнштейн, Собрание трудов, т. 3, изд-во «Наука», 1966, стр. 134.)
2. Debye P., Ann. d. Phys., **39**, 789 (1912).
3. Born M., von Kármán T., Phys. Zs., **13**, 297 (1912).
4. Born M., von Kármán T., Phys. Zs., **14**, 15 (1913).
5. Born M., von Kármán T., Phys. Zs., **14**, 65 (1913).
6. Debye P., Verhandl. Deut. Phys. Ges., **15**, 678 (1913).
7. Waller I., Zs. Phys., **17**, 398 (1923).
8. Debye P., Verhandl. Deut. Phys. Ges., **15**, 857 (1913).
9. Debye P., Ann. Phys., **43**, 49 (1914).
10. Brillouin L., Compt. Rend., **158**, 1331 (1914).
11. Brillouin L., Ann. de Phys., **17**, 88 (1922).
12. Grüneisen E., Verhandl. Deut. Phys. Ges., **13**, 426 (1911).
13. Slater J. C., Introduction to Chemical Physics, New York, 1939.
14. Ziman J., Electrons and Phonons, Oxford, 1960. (См. перевод: Дж. Займан, Электроны и фононы, ИЛ, 1962.)
15. Peierls R., Ann. Phys., **3**, 1055 (1929).
16. Ott H., Ann. Phys., **23**, 169 (1936).
17. Born M., Sarginson K., Proc. Roy. Soc., **A179**, 69 (1941).
- 18*. Киттель Ч., Квантовая теория твердых тел, изд-во «Наука», 1967.
- 19*. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, 2-е изд., изд-во «Наука», 1964.

КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ МЕТАЛЛОВ
И ДИЭЛЕКТРИКОВ

§ 1. Экспериментальное исследование колебательных спектров

В предыдущей главе было показано, что спектры колебаний кристаллической решетки можно исследовать с помощью теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей или неупругого рассеяния нейтронов. Первым был использован метод теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей, но он оказался экспериментально более сложным и в дальнейшем был почти полностью вытеснен методом рассеяния нейтронов. Ранние результаты были получены рентгеновским методом, главным образом вскоре после второй мировой войны, когда нейтронный метод еще не применялся для этих целей. Трудности, возникающие при использовании первого метода, обусловлены рядом факторов. Во-первых, как уже было отмечено, рассеяние в данном направлении может быть обусловлено не одной, а всеми модами нормальных колебаний. Действительно, направление рассеяния зависит только от волнового вектора рассеивающей волны \mathbf{k}_1 . Обычно он равен волновому вектору \mathbf{q} упругой волны; поскольку данным волновым вектором \mathbf{q} обладают $3g$ упругих волн, все они будут рассеивать в одном и том же направлении. Рентгеновский метод применялся почти исключительно к кристаллам с одним атомом в элементарной ячейке, когда упругих волн всего три, а в некоторых направлениях, например $[100]$ или $[111]$ в кубическом кристалле, число их вследствие вырождения снижается до двух. Можно разделить вклады двух волн, используя тот факт, что амплитуда рассеяния, как показано в предыдущей главе, зависит от скалярного произведения $\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{W}(s, l, \mathbf{q})$. Здесь через \mathbf{k}_1 обозначен волновой вектор звуковой волны (при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{q}$ мы не имеем дела с процессами переброса), а через \mathbf{W} — вектор в направлении колебаний s -го атома в l -й моде с волновым вектором \mathbf{q} (в данном случае этот атом единственный в элементарной ячейке, а колебания продольные или поперечные). Для колебаний, направление которых перпендикулярно волновому вектору рассеивающей волны, такие скалярные произведения равны нулю; используя этот факт, можно получить информацию

относительно различных ветвей спектра. Таким способом был исследован ряд кристаллов и получены ценные результаты¹⁾.

Метод неупругого рассеяния нейтронов свободен от указанных недостатков. Дело в том, что в данном случае можно определять не только направления движения рассеянных нейтронов, но и их энергии. Поэтому можно независимо определить обе величины — частоту звуковой волны ω_1 и ее волновой вектор k_1 (или q). Волны, распространяющиеся в одном и том же направлении, но имеющие различные частоты, будут при рассеянии отдавать нейтронам разные количества энергии; напомним, что энергия $\hbar\omega_1$ велика по сравнению с энергией падающих нейтронов. Следовательно, в каждом направлении будут рассеиваться нейтроны с разными энергиями, что и даст возможность разделить колебания с одним и тем же волновым вектором, но принадлежащие разным ветвям спектра. Следует отметить, что в принципе это можно было бы сделать и при рассеянии рентгеновских лучей, однако в этом случае частота звуковой волны ω_1 так мала по сравнению с частотой рентгеновских лучей ω_0 , что изменение частоты не удастся обнаружить экспериментально. Напротив, в случае нейтронов измерение этой величины не составляет труда.

Для сравнения заметим, что в видимой области, для которой имеются спектроскопы с гораздо большей разрешающей силой, чем в рентгеновском диапазоне, измерить сдвиг частоты рассеянного света несложно. Обычный метод изучения ультразвука состоит в том, что в жидкости или твердом теле возбуждается ультразвуковая волна и наблюдается брэгговское рассеяние (или рассеяние Дебая — Сирса) пучка видимого света волновыми поверхностями звуковой волны. Изменение частоты легко определить; отсюда находятся значения частоты волны ω_1 и ее волнового вектора k_1 (или q), а затем — скорость звуковой волны. Возникает вопрос, почему в таком случае нельзя получить интересующую нас информацию о спектре колебаний кристаллической решетки? Причина состоит в том, что в обычной звуковой волне величина вектора q (или k_1) очень мала по сравнению с размерами зоны Бриллюэна, и мы получаем сведения лишь о непосредственной окрестности начала координат обратной решетки (т. е. центра зоны Бриллюэна).

Чтобы получить сведения о звуковых волнах, волновые векторы q которых охватывают всю зону Бриллюэна, необходимо, во-первых, получить эти волны и, во-вторых, уметь их исследо-

¹⁾ Тепловому диффузному рассеянию рентгеновских и световых лучей посвящены статьи, ссылки на которые помещены в конце данной главы.

вать. Современная техника не позволяет генерировать достаточно короткие звуковые волны, пригодные для нашей цели. Поэтому остается использовать только тепловые волны, которые всегда имеются в кристалле. Что же касается их исследования, то в силу формулы Вульфа — Брэгга ($\lambda = 2d \sin \theta$) метод бриллюэновского рассеяния можно использовать лишь в том случае, если длина волны λ меньше удвоенного расстояния между двумя волновыми поверхностями звуковой волны (поскольку $\sin \theta < 1$). Так как краю зоны Бриллюэна соответствует длина звуковой волны, равная удвоенному межатомному расстоянию, то для исследования всей зоны Бриллюэна требуются электромагнитные волны, длины которых сравнимы с межатомным расстоянием. В спектре электромагнитных волн этому требованию отвечают рентгеновские лучи; такой же длиной волны обладают и нейтроны.

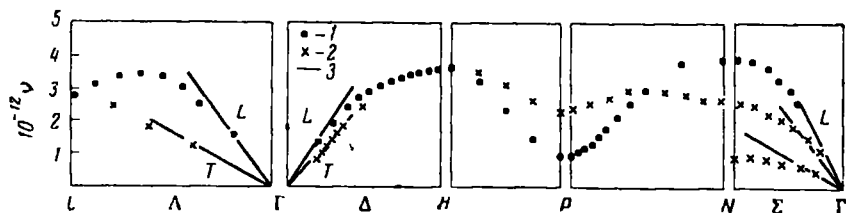
Из этих рассуждений вытекает, что для исследования спектра упругих колебаний удобнее всего использовать метод рассеяния нейтронов. Единственный недостаток его состоит в том, что нейтронные пучки, получаемые от всех атомных реакторов, кроме самых больших, довольно слабы, и для изучения рассеяния необходимы большие экспозиции. Ввиду большой стоимости реакторов такие опыты оказываются очень дорогими, поэтому они ставятся в основном в разного рода правительственных лабораториях, где имеются большие реакторы. Наиболее интересные работы в этой области были выполнены в лаборатории Чок Ривер (Канада) под руководством Брокхауза и в Брукхэйвенской национальной лаборатории (США) под руководством покойного Д. Дж. Хьюза и его ассистентов Палевского, Эйзенхауэра и др.¹⁾

В результате проведенной работы получена надежная информация об упругих спектрах ряда металлов, щелочногалоидных кристаллов, а также полупроводников германия и кремния. Для тех металлов, которые изучались также с помощью теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей, результаты, полученные двумя методами, хорошо согласуются между собой. Как уже упоминалось, значения решеточной теплоемкости и других тепловых характеристик кристалла, рассчитанные по экспериментально найденным упругим спектрам, согласуются с независимыми экспериментальными данными. В следующем параграфе мы рассмотрим вид колебательных спектров решетки для различных элементов и соединений.

¹⁾ Из работ, указанных в библиографии в конце книги, рассматриваемой теме посвящены статьи, список которых приведен в конце этой главы.

§ 2. Результаты экспериментального определения спектров колебаний решетки

Рассмотрим сначала колебательный спектр металлического натрия, определенный по рассеянию нейтронов [1, 2]. На фиг. 8.1 показана зависимость частоты поперечных и продольных акустических колебаний от волнового вектора, направленного вдоль одной из осей симметрии зоны Бриллюэна. Графики расположены в основном так же, как и в случае электронных зон. Направлениям $[001]$ и $[111]$ (оси Δ и Λ) отвечает вырожденная поперечная мода с двумя направлениями вектора поляризации,



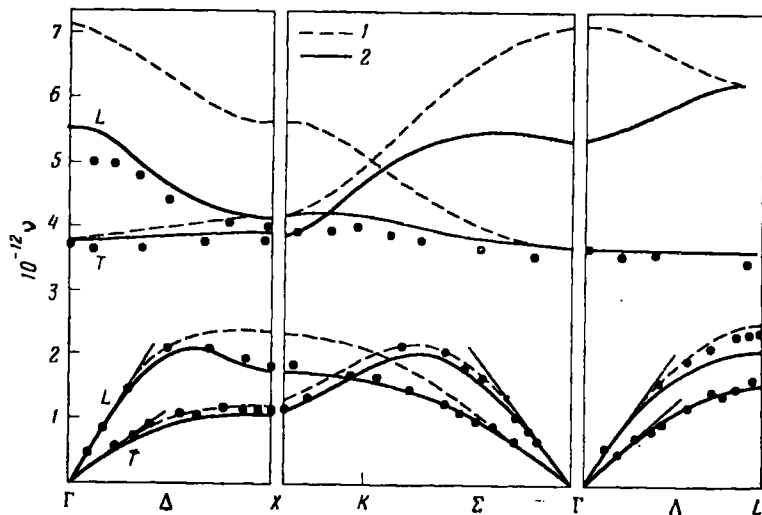
Фиг. 8.1. Частоты колебаний решетки металлического натрия в зависимости от волнового вектора для направлений $[100]$ (ось Δ), $[110]$ (ось Σ) и $[111]$ (ось Λ), а также для других направлений в зоне Бриллюэна [1].

1 — продольные колебания; 2 — поперечные колебания; 3 — длинноволновый предел, определяемый из макроскопических упругих постоянных.

перпендикулярными волновому вектору, и невырожденная продольная мода. В направлении $[011]$ (ось Σ) симметрия не приводит к вырождению, и три моды разделяются. Во всех этих направлениях частота продольных колебаний выше, чем у поперечных. Это соответствует общему положению: продольным колебаниям, при которых вещество сжимается и растягивается, соответствует большая квазиупругая сила, чем поперечным, при которых происходит изгиб. В этом случае, конечно, нет оптических ветвей, поскольку в объемноцентрированной кубической элементарной ячейке натрия содержится лишь один атом и возможны только акустические ветви. На фиг. 8.1 для каждого из указанных направлений сплошными линиями показаны результаты, полученные путем измерения упругих постоянных при низких частотах; по наклону этих линий можно определить скорость звука. Как видно, эти прямые линии дают правильный предельный вид дисперсионных кривых при низких частотах. Чтобы получить хорошее согласие, нужно пользоваться упругими постоянными для той температуры (в данном случае 90°K), при которой проводились и опыты по рассеянию нейтронов. Фиг. 8.1, где точками изображены непосредственные экспериментальные

результаты без какой-либо теоретической обработки, иллюстрирует точность, с которой этот метод позволяет экспериментально определять упругие спектры.

Аналогичные результаты были получены для ряда других металлов с одним атомом в элементарной ячейке, например для алюминия и ванадия. Для сравнения рассмотрим теперь щелочногалогидный кристалл с двумя атомами в элементарной ячейке:

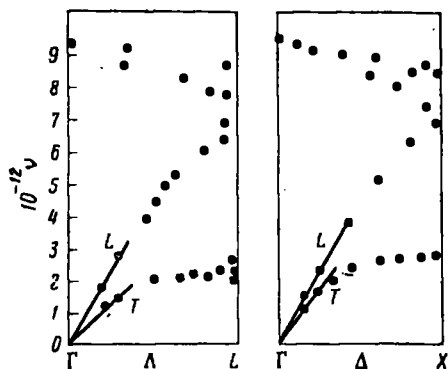


Фиг. 8.2. Колебательный спектр решетки иодистого натрия [3].
 В верхней части показаны оптические ветви, в нижней — акустические.
 1 — модель точечных ионов; 2 — оболочечная модель (см. гл. 9, § 5).

На фиг. 8.2 показаны результаты для кристалла иодистого натрия для нескольких направлений в зоне Бриллюэна [3]. Кроме экспериментальных точек и прямых, найденных путем измерения упругих постоянных, там приведены два набора кривых, вычисленных теоретически (к этой проблеме мы еще вернемся в гл. 9, § 5). Сплошные кривые, найденные с помощью так называемой оболочечной модели, хорошо согласуются с опытом. Как видно из фиг. 8.2, в кристаллах с двумя атомами в элементарной ячейке нижняя акустическая ветвь спектра почти такая же, как у натрия, но, кроме того, имеется еще более высокая оптическая ветвь, состоящая из двукратно вырожденной поперечной моды и невырожденной продольной моды, так что полное число мод, как и должно быть, равно шести, т. е. $3g$ при $g = 2$.

В качестве третьего примера на фиг. 8.3 представлен колебательный спектр решетки германия [4]. Элементарная ячейка

последнего, как и у щелочногалогидных кристаллов, содержит 2 атома, но теперь они, разумеется, одинаковы. В этом случае симметрия кристалла требует, чтобы продольные акустические и оптические моды были вырождены в точке X, лежащей на пересечении прямой [100] (ось Δ) с границей зоны Бриллюэна. Это вырождение в некоторой степени аналогично вырождению энергетических зон германия [5]¹⁾. Колебательный спектр кремния,



Фиг. 8.3. Колебательный спектр решетки германия [4].

как и следовало ожидать, подобен спектру германия. Рассмотренные три случая типичны для того довольно ограниченного набора веществ, который был экспериментально изучен. Как уже упоминалось, попытки теоретического расчета колебательных спектров будут рассмотрены в гл. 9, § 5. Предварительно, однако, мы обсудим в следующем параграфе интересное и хорошо известное явление — так называемые остаточные лучи. Это явление наблюдалось в щелочногалогидных и подобных им ионных кристаллах, изучение которых было начато в начале нашего века. Рубенс и другие экспериментаторы исследовали отражение от кристаллов в дальней инфракрасной области спектра. Они обнаружили максимум отражательной способности при вполне определенной частоте, которую можно определить, наблюдая многократное отражение излучения с непрерывным спектром зеркалами из исследуемого материала. При спектроскопическом исследовании излучения, претерпевшего многократное отражение, оно оказывается почти монохроматическим, чем и определяется частота, отвечающая максимуму отражения. Название «остаточные лучи» связано с тем, что именно они остаются после многократного рассеяния. В те времена, когда эти лучи были открыты, их объясняли колебаниями подрешетки положительных ионов относительно подрешетки отрицательных ионов. Это означает, что весь кристалл ведет себя как осциллирующий диполь; согласно грубым оценкам соответствующей квазиупругой силы, резонансная частота здесь должна лежать как раз в той части спектра, где наблюдалось это явление. Независимое

как и следовало ожидать, подобен спектру германия.

Рассмотренные три случая типичны для того довольно ограниченного набора веществ, который был экспериментально изучен. Как уже упоминалось, попытки теоретического расчета колебательных спектров будут рассмотрены в гл. 9, § 5. Предварительно, однако, мы обсудим в следующем параграфе интересное и хорошо известное явление — так называемые остаточные лучи. Это явление наблюдалось в щелочногалогидных и

¹⁾ См. также [18] и фиг. 2 приложения А. — Прим. ред.

исследование колебательных спектров позволяет проверить правильность этой гипотезы. Суть дела ясна из теории Борна — Кармана. Действительно, рассмотрим поперечные оптические колебания решетки щелочногалогидного кристалла в центре зоны Бриллюэна, т. е. при $q = 0$. Легко убедиться, что при этом два иона в элементарной ячейке колеблются в противофазе; поскольку при $q = 0$ длина волны бесконечна, так же ведут себя и все остальные элементарные ячейки кристалла. Другими словами, явление остаточных лучей обусловлено поперечными оптическими колебаниями с волновым вектором $q = 0$. Поэтому наблюдаемая частота остаточных лучей должна совпадать с частотой поперечных оптических колебаний при $q = 0$ (см., например, фиг. 8.2). Такое совпадение действительно наблюдалось на опыте. Таким образом, колебательные спектры, определенные методом рассеяния нейтронов, связаны не только с наблюдаемыми упругими постоянными кристалла, но и с наблюдаемыми остаточными лучами, или с максимумом отражательной способности в инфракрасной области. Эта высокая отражательная способность, однако, означает наличие резонанса в оптическом показателе преломления кристалла. Тем самым намечается (не упоминавшаяся до сих пор) связь между оптическими свойствами и механическими колебаниями решетки. Эта связь будет рассмотрена в следующем параграфе.

§ 3. Взаимодействие звуковых и электромагнитных волн в кристаллах

Исследуя вопрос о происхождении остаточных лучей, мы рассматривали относительное движение подрешеток положительных и отрицательных ионов. При более широком взгляде на проблему она сводится просто к задаче о перемещенном электрическом дипольном моменте, обусловленном на сей раз движением ионов как целого (а не электронов, как раньше). При наличии линейной возвращающей силы (в соответствии с нашей трактовкой колебаний решетки) выполняются все условия применимости теории Друде — Лорентца. Необходимо лишь слегка видоизменить ее, понимая под величиной m в уравнениях движения не массу электрона, а приведенную массу ионов. Рассмотрение остаточных лучей мы начнем с вывода формулы типа (4.11) для диэлектрической проницаемости; поправку Лорентца, однако, будем рассматривать по образцу (4.51). При этом мы опустим в уравнении движения член, учитывающий затухание. Получим

$$\kappa_e = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0) - \omega^2}, \quad (8.1)$$

где N — число положительных ионов в единице объема (предполагается, что они движутся относительно такого же количества отрицательных ионов), m — приведенная масса ионов, ω_0 — резонансная частота вещества в отсутствие поправки Лорентца; при наличии этой поправки резонансная частота равна

$$\sqrt{\omega_0^2 - \frac{Ne^2}{3me_0}}. \quad (8.2)$$

Согласно изложенной элементарной теории, это и есть частота, измеряемая экспериментально при наблюдении остаточных лучей.

В предыдущем параграфе было показано, что частоту волны ω удобно выражать как функцию волнового вектора k (или q). Эти величины связаны соотношением

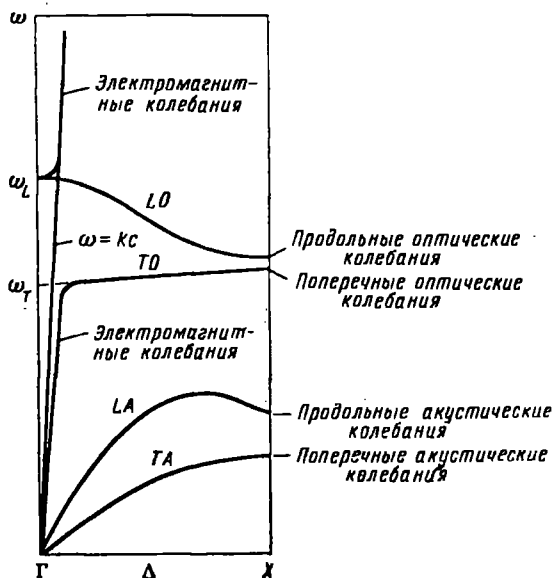
$$k_e = \left(\frac{kc}{\omega}\right)^2, \quad (8.3)$$

где c — скорость света в пустоте. Равенство (8.3) вытекает из соотношений (4.17) и (4.18) и из того факта, что фазовая скорость волны равна ω/k . Подставляя (8.3) в (8.1), получим уравнение, связывающее ω и k . На фиг. 8.4 показана найденная таким путем зависимость ω от k , а также зависимость $\omega(k)$ для колебаний решетки иодистого натрия, распространяющихся в направлении [100] (см. фиг. 8.2). Нас интересуют сейчас некоторые особенности, вытекающие из уравнения (8.1) и характерные для случая малых k ; на фиг. 8.2 они не показаны, а теперь мы их рассмотрим.

В действительности область малых k на фиг. 8.4 должна быть еще более сжата по направлению к оси ординат. При этом указанные особенности очень трудно было бы заметить. Соответственно пришлось изобразить эту область с нарушением масштаба. Прежде всего, на фиг. 8.4 видна почти вертикальная прямая линия, проходящая через начало координат и описываемая уравнением $k = \omega/c$ или $\omega = kc$. Как упоминалось выше, отношение ω/k представляет собой фазовую скорость. Однако ранее не было отмечено, что для акустической ветви при $k=0$ скорость звука определяется наклоном касательной к кривой, равным ω/k . Тот факт, что кривая $\omega(k)$ не совпадает с прямой линией, указывает на наличие дисперсии: при высоких частотах скорость звуковых волн уменьшается. Напомним, что наклон кривой $d\omega/dk$ определяет групповую скорость, которая при наличии дисперсии отлична от фазовой. Теперь легко понять физический смысл прямой $\omega = kc$. Она описывает распространение волн со скоростью света в вакууме $\omega/k = c$. Поскольку последняя на много порядков превышает скорость звуковых волн, наклон этой

прямой столь велик, что в правильном масштабе она была бы практически вертикальной; однако, как было сказано, ей придан гораздо меньший наклон, чтобы можно было рассмотреть эту часть фигуры.

В элементарной трактовке предыдущего параграфа мы в сущности рассматривали пересечение этой почти вертикальной



Фиг. 8.4. Колебательный спектр решетки иоди-стого натрия.

Схематически показано влияние взаимодействия с электромагнитными колебаниями при очень малых волновых числах (т. е. при очень больших длинах волн) [7].

линии с кривой $\omega(k)$ для поперечных оптических колебаний решетки. При поглощении света в кристалле исчезает квант света, фотон, и возникает квант упругих колебаний, фонон, забирающий энергию и импульс фотона. Законы сохранения выполняются в той точке, где кривая $\omega(k)$ для поперечных оптических колебаний решетки пересекается с прямой $\omega = kc$ для фотона: именно там оба кванта будут обладать одной и той же частотой (а следовательно, и энергией) и одним и тем же волновым вектором k (а значит, и импульсом). Так как прямая $\omega = kc$ почти вертикальна, то частота остаточных лучей будет практически равна величине ω_T (см. фиг. 8.4), соответствующей пересечению кривой $\omega(k)$ для поперечных оптических колебаний с

осью ординат. Именно это значение и получалось из элементарной теории.

Однако в действительности дело обстоит сложнее. Мы уже отмечали, что для электромагнитных волн, распространяющихся в диэлектрике, диэлектрическая проницаемость равна $(kc/\omega)^2$. Принимая во внимание равенство (8.1), получаем

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0) - \omega^2} \right). \quad (8.4)$$

Как мы знаем, это уравнение определяет зависимость $|k|$ от ω в области аномальной дисперсии вблизи частоты остаточных лучей; именно эта зависимость и показана в левой части фиг. 8.4. Рассматриваемая кривая описывает распространение электромагнитной волны в диэлектрике (если в уравнении движения колеблющихся частиц пренебречь затуханием). Рассмотрим некоторые особенности этой кривой, выражающие просто факт существования аномальной дисперсии в терминах зависимости ω от $|k|$.

Начнем со случая, когда частота ω мала по сравнению с величиной $\sqrt{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)}$. Тогда

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)} \right). \quad (8.5)$$

Для этой части кривой частота ω пропорциональна $|k|$, а скорость $\omega/|k|$ меньше скорости света c : Она представляет собой просто скорость распространения электромагнитной волны в среде с показателем преломления, равным корню квадратному из диэлектрической проницаемости, стоящей в скобках в формуле (8.5). Этому соответствует прямолинейная при малых ω и $|k|$ часть кривой с наклоном, несколько меньшим величины c , равной скорости света в вакууме.

Пусть теперь частота ω стремится к величине $\sqrt{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)}$. Как видно из формулы (8.4), при этом волновой вектор $|k|$ обращается в бесконечность. В действительности рассматриваемая кривая сливается здесь с другой кривой, выражающей зависимость $\omega(|k|)$ для поперечных оптических колебаний решетки. Согласно нашей упрощенной теории, последняя зависимость изображается прямой линией; в действительности отклонение от прямой имеет место только в области длин волн, малых по сравнению с длиной рассматриваемой электромагнитной волны в вакууме. Иначе говоря, мы имеем моду колебаний, которая при частотах, гораздо меньших критического значения $\sqrt{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)}$, представляет собой электромагнитную волну, а вблизи этого значения превращается в упругую

волну. Борн и Хуан Кунь [6-8], которым мы здесь следуем, исследовали соотношение между амплитудами электромагнитных и упругих колебаний при переходе через область, где происходит это превращение. Они показали, что на почти вертикальном участке кривой электромагнитное поле велико, а амплитуда упругих колебаний мала; на почти горизонтальном участке положение меняется на обратное. Другими словами, в указанной области между электромагнитной и упругой волнами нет четкого различия, а происходит быстрый переход одной волны в другую. Сказанное относится только к поперечным механическим колебаниям, ибо только они могут взаимодействовать с поперечной электромагнитной волной. Заметим, что критическая частота $\sqrt{\omega_0^2 - (Ne^2/3me_0)}$ совпадает с частотой остаточных лучей ω_T , соответствующей пересечению кривой оптических колебаний с осью ординат.

Рассмотрим теперь другие особенности распространения электромагнитных волн. Имеется область частот, в которой величина волнового вектора $|\mathbf{k}|$, определяемая формулой (8.4), оказывается мнимой; при этих частотах колебания не распространяются, а затухают. Это происходит в области частот, лежащей между упомянутым выше значением ω_T и частотой, при которой $|\mathbf{k}|=0$, так что диэлектрическая проницаемость обращается в нуль. Соответствующие формулы будут вскоре выписаны; пока лишь мы обратим внимание на следующий замечательный факт: верхняя граница указанной области совпадает с величиной ω_L , к которой стремится частота продольных оптических колебаний, когда волновой вектор \mathbf{k} приближается к нулю. Причину такого совпадения можно понять, исходя из уравнений Максвелла и следуя тем же рассуждениям, которые использовались для плазменных колебаний в гл. 5, § 2. Напомним, что последние представляют собой продольные электромагнитные волны, которые могут существовать только в том случае, если диэлектрическая проницаемость обращается в нуль (так чтобы индукция \mathbf{D} и величина $\text{div } \mathbf{D}$, пропорциональная плотности заряда, также могли обращаться в нуль). Таким образом, предельное значение частоты продольных оптических колебаний при больших длинах волн должно соответствовать нулевому значению диэлектрической проницаемости.

Итак, функция $\omega(|\mathbf{k}|)$ для электромагнитных волн в диэлектрике при $|\mathbf{k}|=0$ принимает значение $\omega=\omega_L$, а при больших частотах приближается к прямой $|\mathbf{k}|=\omega/c$, описывающей распространение света в пустоте. Асимптотический характер приближения кривой $\omega(|\mathbf{k}|)$ к этой прямой показан в верхней части фиг. 8.4. Кривая $\omega(\mathbf{k})$ здесь лежит выше прямой $\omega = kc$. Это

означает, что фазовая скорость больше скорости света, т. е. показатель преломления меньше единицы; такая ситуация типична для явления аномальной дисперсии при частотах выше резонансной. Групповая скорость, определяемая наклоном кривой, всегда меньше скорости света c .

Окончательный результат, к которому приводит рассмотрение взаимодействия решетки с электромагнитной волной, сводится к необходимости добавить еще одну ветвь кривой $\omega(|\mathbf{k}|)$. При этом каждому значению величины $|\mathbf{k}|$ будут отвечать три вида поперечных колебаний: поперечные акустические, поперечные оптические и электромагнитные. Два последних вида колебаний взаимодействуют друг с другом, так что волна одного типа непрерывно переходит в волну другого типа, и кривые $\omega(|\mathbf{k}|)$, отвечающие этим двум видам колебаний, не пересекаются. В области между частотами ω_T и ω_L происходит поглощение поперечных волн. Если ввести в дифференциальное уравнение член, описывающий поглощение, то окажется, что максимуму поглощения соответствует частота ω_T . Тем самым подтверждается, что именно она соответствует остаточным лучам (ибо высокая отражательная способность, ответственная за явление остаточных лучей, связана с максимумом поглощения). опыты показывают, что выше этой частоты имеется широкая область поглощения, обусловленная, по-видимому, рассмотренным только что явлением.

Теперь можно перейти к выводу формул, связывающих особенности поведения диэлектрической проницаемости с частотами ω_T и ω_L . Эти формулы впервые были получены Лиддейном и сотр. [9-11], а также Фрелихом и Моттом [12]; позднее на них обратил особое внимание Кохрэн [13]). Напомним, что ω_T есть частота, при которой обращается в нуль знаменатель дроби в формуле (8.1) для диэлектрической проницаемости, а ω_L — частота, при которой становится равной нулю сама диэлектрическая проницаемость. Таким образом,

$$\omega_T^2 = \omega_0^2 - \frac{Ne^2}{3m\epsilon_0},$$

$$1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{-\omega_L^2 + \omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)} = 0, \quad (8.6)$$

$$\omega_L^2 = \omega_0^2 + \frac{2Ne^2}{3m\epsilon_0}.$$

1) См. также библиографию в конце книги.

Отсюда находим

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = \frac{\omega_0^2 + 2Ne^2/3m\epsilon_0}{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)} = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)} = \frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}, \quad (8.7)$$

где κ_0 — диэлектрическая проницаемость при нулевой частоте, а κ_∞ — диэлектрическая проницаемость при бесконечно большой частоте (в данном случае равная единице). Это соотношение, полученное в работе [11], устанавливает связь между предельными значениями частот продольных и поперечных оптических колебаний при $|\mathbf{k}|=0$ и диэлектрической проницаемостью. Как будет показано в следующем параграфе, оно справедливо не только в рассмотренном здесь простом случае, но и при гораздо более общих условиях. В частности, оно выполняется и при учете электронной поляризуемости ионов. При этом следует лишь понимать под κ_∞ диэлектрическую проницаемость при частотах, с одной стороны, значительно превышающих частоту инфракрасных остаточных лучей, вблизи которой наблюдается аномальная дисперсия, а с другой — малых по сравнению с резонансной частотой электронных переходов, ответственных за электронную поляризуемость (последняя частота лежит в ультрафиолетовой области).

В гл. 4, § 4 указывалось на возможность появления очень больших значений поправки Лорентца $Ne^2/3m\epsilon_0$, обусловленной электронной поляризуемостью. В частности, было замечено, что при этом резонансная частота $\sqrt{\omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)}$ может упасть до нуля, что должно привести к бесконечному значению диэлектрической проницаемости при нулевой частоте, т. е. к явлению сегнетоэлектричества [через ω_p в (4.4) обозначалась резонансная частота электронов]. Мы уже упоминали, что это маловероятно, однако при совместном действии электронной и решеточной поляризации указанное явление становится возможным. Теперь мы исследовали решеточную поляризацию. Видно, что она дает такой же вклад, что и электронная. Поскольку в реальных ионных кристаллах (например, щелочногалогенидных) имеют место оба типа поляризации, естественно возникает вопрос о совместной их трактовке. Этим мы займемся в следующем параграфе.

Предварительно, однако, заметим, что, как показал Кохрэн [13], при стремлении к нулю знаменателя в формуле (8.7) (этому соответствует характерная для сегнетоэлектрика бесконечная диэлектрическая проницаемость при нулевой частоте) отношение ω_L^2/ω_T^2 стремится к бесконечности, т. е. частота ω_T приближается к нулю. К этому выводу об обращении в нуль частоты поперечных оптических колебаний в случае сегнетоэлектрика

можно прийти также в рамках гораздо более общих моделей, и он, несомненно, верен. В § 5 мы обсудим возможность экспериментальной его проверки.

§ 4. Решеточная и электронная поляризация

В предыдущих параграфах было показано, что в известном приближении влияние колебаний решетки на диэлектрическую проницаемость ионного (например, щелочногалоидного) кристалла можно описывать, просто вводя соответствующий резонансный член в теорию Друде — Лорентца. Как видно из фиг. 8.4, это возможно при длинах волн, больших по сравнению с постоянной решетки. При переходе к меньшим длинам волн (т. е. к большим волновым векторам) необходима более сложная теория колебаний решетки, учитывающая дисперсию этих колебаний. Резонансная частота для колебаний решетки, ответственных за явление остаточных лучей, имеет вид (8.2), если только в данном случае оправдано использование поправки Лорентца.

Однако, как уже упоминалось в предыдущем параграфе, в диэлектрическую проницаемость (или показатель преломления) ионного кристалла дает вклад и электронная поляризация, которую можно описывать с помощью метода Друде — Лорентца. Согласно квантовой теории дисперсии, разработанной Крамерсом и Гейзенбергом, резонансные частоты здесь соответствуют электронным переходам из основного электронного состояния кристалла в возбужденные состояния.

Общий характер энергетических зон щелочногалоидных кристаллов показан на фиг. 10.27 и 10.28 книги [5]¹⁾. В случае NaCl верхняя заполненная зона соответствует атомной орбитали $Cl^- 3p$ (мы пользуемся терминологией метода линейных комбинаций атомных орбит); нижняя пустая зона (зона проводимости) отвечает возбужденным состояниям иона Cl^- , состоянию $Na 3s$ и более высоким уровням. Между ними имеется широкая запрещенная зона. Такие же запрещенные зоны характерны и для других кристаллов данного типа. Опыт показывает, что они соответствуют частотам в дальней ультрафиолетовой области. Именно там начинается сильное поглощение, в то время как при более низких частотах кристаллы довольно прозрачны [14]. Фактически поглощение данного типа нельзя вполне корректно описать на языке энергетических зон. Скорее здесь имеет место возникновение экситонов — комплексов, образующихся вследствие взаимодействия электронов зоны проводи-

¹⁾ См. также [18]. — *Прим. ред.*

мости с дырками в валентной зоне. Указанное взаимодействие приводит к появлению орбит, по которым электрон и дырка обращаются вокруг друг друга под действием кулоновского притяжения. Образование экситонов будет рассмотрено в следующем томе, здесь мы лишь вкратце упомянем о нем в приложении 2. Это явление, однако, лишь слегка изменяет ситуацию, и потому для начала в элементарном изложении можно просто принять, что у щелочногалоидных кристаллов в дальней ультрафиолетовой области лежит полоса сильного поглощения. Последнее имеет место, конечно, и при более коротких волнах, где оно вызвано возбуждением электронов внутренних атомных оболочек.

При учете всех этих источников поглощения мы получаем для показателя преломления формулу вида (4.12). Как было указано в гл. 4, § 4, поправку Лорентца можно учесть, модифицируя резонансные частоты ω_k . Наименьшей из них в формуле (4.12) будет частота, связанная с колебаниями решетки. В предыдущем параграфе было показано, что в этом случае вместо резонансной частоты ω_k следует подставить ω_T , а вместо m — приведенную массу иона. При рассмотрении электронных переходов необходимо пользоваться дисперсионной формулой Крамера — Гейзенберга (4.48), в которую входят частоты, лежащие в дальней ультрафиолетовой и рентгеновской областях спектра. Вклад этих электронных составляющих поляризуемости в диэлектрическую проницаемость, определяемую формулой (4.12), будет практически постоянным, не зависящим от частоты во всей инфракрасной области, где наблюдаются остаточные лучи. Обозначим диэлектрическую проницаемость, соответствующую электронной части поляризуемости, через κ_∞ (это есть значение диэлектрической проницаемости при частотах, высоких по сравнению с ω_T , но, конечно, не при бесконечно большой частоте). Тогда мы можем переписать формулы гл. 8, § 3, в виде, учитывающем как решеточную, так и электронную поляризуемость, не делая каких-либо специальных допущений относительно поправки Лорентца.

При этом вместо (8.1) будем иметь

$$\kappa_e = \kappa_\infty + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_T^2 - \omega^2}, \quad (8.8)$$

где, как и раньше, m — приведенная масса ионов. Напомним, что для κ_∞ область аномальной дисперсии лежит в ультрафиолетовой части спектра, а в инфракрасном диапазоне эта величина постоянна. Вместо формулы (8.4) получаем

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(\kappa_\infty + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_T^2 - \omega^2} \right). \quad (8.9)$$

Уравнение для частоты продольных колебаний ω_L , заменяющее (8.6), получается из условия равенства нулю диэлектрической проницаемости. Это дает

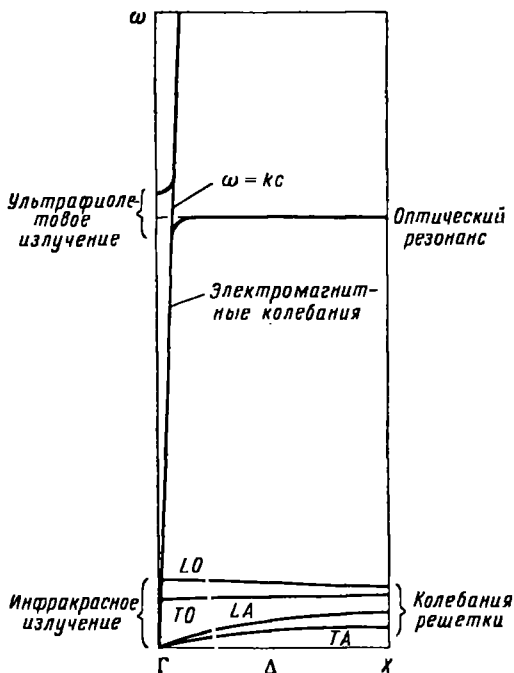
$$\kappa_\infty + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\omega_T^2 - \omega_L^2} = 0. \quad (8.10)$$

Вместо соотношения (8.7) будем иметь

$$\frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} = 1 + \frac{Ne^2/m\epsilon_0}{\kappa_\infty \omega_T^2} = \frac{\kappa_0}{\kappa_\infty}, \quad (8.11)$$

где, как и раньше, через κ_0 обозначена диэлектрическая проницаемость при нулевой частоте. Другими словами, соотношение

$\omega_L^2/\omega_T^2 = \kappa_0/\kappa_\infty$ выполняется и в данном, более общем, случае и не зависит от каких-либо специальных допущений относительно законности введения поправки Лорентца.



Фиг. 8.5. Схема, подобная фиг. 8.4, но продолженная в область гораздо более высоких частот.

Показано влияние электронного резонанса в ультрафиолетовой области на вид кривой $\omega(k)$.

горизонтальная ветвь кривой $\omega(k)$, над которой в области ультрафиолетового поглощения лежит запрещенная зона. Последняя, как мы уже знаем, соответствует области частот, в которой в кристалле могут распространяться лишь сильнозатухающие электромагнитные волны, но никак не синусоидальные.

Интересно посмотреть, как будет выглядеть график функции $\omega(k)$ в рассматриваемом случае, когда имеются электронные резонансы. Ожидаемый вид зависимости схематически представлен на фиг. 8.5. Здесь инфракрасная часть спектра сжата и показана в нижней части фигуры, а в ультрафиолетовой области частот появляется новая, практически горизонтальная ветвь кривой $\omega(k)$, над которой в области ультрафиолетового поглощения лежит запрещенная зона.

Мы уже несколько раз упоминали о том, что поперечная оптическая частота ω_T может приближаться к нулю при условии, что одновременно диэлектрическая проницаемость при нулевой частоте κ_0 стремится к бесконечности. Так обстоит дело в сегнетоэлектрических материалах, которые мы рассмотрим в следующем параграфе. Если исходить из соотношения (8.7), то величина $Ne^2/3m\epsilon_0$ при этом должна быть равна ω_0^2 . В действительности, однако, для этой величины получаются гораздо меньшие значения. Тем не менее, введя в теорию две поправки, можно добиться того, чтобы частота ω_T обращалась в нуль. Для этого, во-первых, необходимо учесть электронную поляризацию, а во-вторых, предположить, что обычная поправка Лорентца слишком мала и должна быть увеличена в b раз ($b > 1$). Как будет показано в следующем параграфе, такая ситуация действительно возможна в сегнетоэлектрических кристаллах. Посмотрим, как изменится наш расчет диэлектрической проницаемости, если ввести две указанные поправки.

Начнем с уравнения (4.20). Вместо локального поля $\mathbf{E} + \mathbf{P}/3\epsilon_0$ подставим $\mathbf{E} + b\mathbf{P}/3\epsilon_0$. Вместо суммы

$$\sum_k \frac{N_k e^2 / m}{\omega_k^2 - \omega^2 + i\omega g_k} \quad (8.12)$$

возьмем только два члена, один из которых отвечает колебаниям решетки, а другой, постоянный член представляет электронный вклад. Мы считаем его постоянным, так как рассматриваем частоты инфракрасного диапазона, которые малы по сравнению с резонансной частотой электронов. В решеточном слагаемом будем, как и ранее в настоящей главе, пренебрегать затуханием. Таким образом, сумма (8.12) заменится на

$$a + \frac{Ne^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (8.13)$$

Тогда вместо уравнения (4.20) получим

$$\mathbf{P} = \left(\mathbf{E} + \frac{b\mathbf{P}}{3\epsilon_0} \right) \left(a + \frac{Ne^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2} \right). \quad (8.14)$$

Решая это уравнение относительно $|\mathbf{P}|/|\mathbf{E}|$ и используя формулу $\kappa_e = 1 + |\mathbf{P}|/\epsilon_0|\mathbf{E}|$, находим

$$\kappa_e = 1 + \frac{a/\epsilon_0 + [(Ne^2/m\epsilon_0)/(\omega_0^2 - \omega^2)]}{1 - (b/3)[(a/\epsilon_0) + (Ne^2/m\epsilon_0)/(\omega_0^2 - \omega^2)]}. \quad (8.15)$$

Диэлектрическую проницаемость при высоких частотах, обозначенную в соотношении (8.8) через κ_∞ , найдем, полагая

$\omega = \infty$. Это дает

$$\kappa_{\infty} = 1 + \frac{a/\epsilon_0}{1 - (b/3)(a/\epsilon_0)}. \quad (8.16)$$

Соотношение (8.16) позволяет выразить постоянную a через κ_{∞} .

Преобразуем теперь выражение (8.15) к виду, аналогичному (8.8). Прежде всего умножим числитель и знаменатель дроби в правой части (8.16) на знаменатель дроби в (8.15). Получим

$$\begin{aligned} \kappa_{\infty} &= \frac{a/\epsilon_0}{1 - ab/3\epsilon_0} \frac{1 - (b/3)[a/\epsilon_0 + (Ne^2/m\epsilon_0)/(\omega_0^2 - \omega^2)]}{1 - (b/3)[a/\epsilon_0 + (Ne^2/m\epsilon_0)/(\omega_0^2 - \omega^2)]} = \\ &= 1 + \frac{a/\epsilon_0 - (ab/3\epsilon_0)(Ne^2/m\epsilon_0)/[(\omega_0^2 - \omega^2)(1 - ab/3\epsilon_0)]}{1 - ab/3\epsilon_0 - (b/3)(Ne^2/m\epsilon_0)/(\omega_0^2 - \omega^2)} = \\ &= \kappa_e - \frac{(Ne^2/m\epsilon_0)/[(\omega_0^2 - \omega^2)(1 - ab/3\epsilon_0)]}{1 - ab/3\epsilon_0 - (b/3)(Ne^2/m\epsilon_0)/(\omega_0^2 - \omega^2)}. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Исключим теперь постоянную a при помощи соотношения (8.16), т. е.

$$\frac{a}{\epsilon_0} = \frac{\kappa_{\infty} - 1}{1 + (b/3)(\kappa_{\infty} - 1)}. \quad (8.18)$$

Отсюда

$$1 - \frac{ab}{3\epsilon_0} = \frac{1}{1 + (b/3)(\kappa_{\infty} - 1)}. \quad (8.19)$$

Подставим выражение (8.19) в уравнение (8.17), решим последнее относительно κ_e и умножим числитель и знаменатель получающейся дроби на $(\omega_0^2 - \omega^2)(1 - ab/3\epsilon_0)$. Результат можно представить в виде

$$\kappa_e = \kappa_{\infty} + \frac{[1 + (b/3)(\kappa_{\infty} - 1)]^2 (Ne^2/m\epsilon_0)}{\omega_0^2 - (b/3)[1 + (b/3)(\kappa_{\infty} - 1)](Ne^2/m\epsilon_0) - \omega^2}. \quad (8.20)$$

Эта формула отличается от (8.1) в трех отношениях. Во-первых, постоянный (нерезонансный) член равен не единице, а κ_{∞} . Во-вторых, в резонансный член входит множитель

$$\left[1 + \frac{b}{3}(\kappa_{\infty} - 1)\right]^2. \quad (8.21)$$

В-третьих, что наиболее существенно, частота ω_T , при которой резонансный член обращается в бесконечность, определяется выражением

$$\omega_T^2 = \omega_0^2 - \frac{b}{3} \left[1 + \frac{b}{3}(\kappa_{\infty} - 1)\right] \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \quad (8.22)$$

вместо прежней формулы (8.6) $\omega_T^2 = \omega_0^2 - (Ne^2/3m\epsilon_0)$. Другими словами, влияние поляризационного члена в части, касающейся компенсации слагаемого ω_0^2 и понижения поперечной частоты ω_T до нуля, возрастает по сравнению с формулой (8.1). Это возрастание характеризуется фактором

$$b \left[1 + \frac{b}{3} (\kappa_\infty - 1) \right]. \quad (8.23)$$

Даже если справедливо обычное выражение для поправки Лорентца, т. е. если $b=1$, фактор (8.23) равен $1 + (\kappa_\infty - 1)/3$. При $\kappa_\infty \gg 1$ он может быть вполне заметным. Если, кроме того, b заметно превышает единицу, то фактор (8.23) может стать очень большим. В следующем параграфе мы рассмотрим истинное положение дел в сегнетоэлектриках и покажем, что указанные два эффекта могут привести к практически бесконечной диэлектрической проницаемости и к почти нулевой частоте поперечных колебаний.

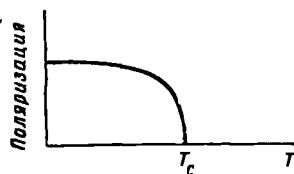
§ 5. Природа сегнетоэлектричества

Довольно большое число кристаллов (в частности, титанат бария $BaTiO_3$) обнаруживает замечательный набор свойств, известный под названием сегнетоэлектричества, или ферроэлектричества (по аналогии с магнитными свойствами ферромагнитных веществ). Выше некоторой критической температуры T_c диэлектрическая проницаемость приближенно описывается выражением

$$\kappa_e = \frac{\text{const}}{T - T_c}, \quad (8.24)$$

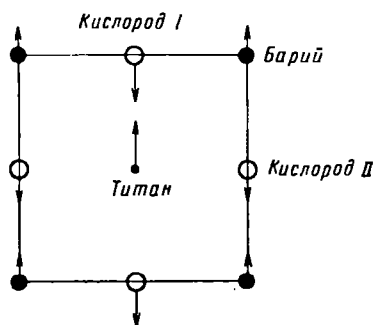
формально обращаясь в бесконечность при $T=T_c$ (в действительности значение κ_e , разумеется, не бесконечно, а лишь очень велико). Ниже критической точки в кристалле устанавливается спонтанная электрическая поляризация; температурная зависимость ее схематически изображена на фиг. 8.6. Одновременно с возникновением спонтанной поляризации кристалл несколько деформируется. При этом происходит как модификация элементарной ячейки, так и (что важнее) относительное смещение положительных и отрицательных ионов. Дело обстоит так, как если бы смещение ионов приводило к постоянной поляризации.

Почти все случаи сегнетоэлектричества отличаются друг от друга. Часто на поляризацию особенно эффективно влияет



Фиг. 8.6. Температурная зависимость спонтанной электрической поляризации сегнетоэлектрика.

смещение ионов водорода (протонов), которые передвигаются от одной потенциальной ямы к другой. Примером может служить кристалл дигидрофосфата калия KH_2PO_4 , поведение которого в электрическом поле определяется движением ионов водорода [17]¹⁾. Пример сегнетоэлектрика совсем другого типа дает нам титанат бария. Высокотемпературная модификация этого кристалла обладает структурой перовскита [5]²⁾. Напомним, что это структура, в которой атом титана расположен в центре



Фиг. 8.7. Относительные смещения ионов при постоянной поляризации титаната бария [15].

Абсолютные значения смещений следующие (за единицу принята длина ребра куба): Ba 0,004; Ti 0,018; OI -0,019; OII -0,010. Эти значения на 0,004 больше указанных в работе [14] (последние данные были получены в предположении о неподвижности ионов бария). Выписанные здесь числа соответствуют почти нулевому смещению полного заряда, если предположить, что кристалл чисто ионный $[\text{Ba}^{+2}\text{Ti}^{+4}(\text{O}^{-2})_3]$.

кубической элементарной ячейки, атомы бария — в вершинах, а атомы кислорода находятся в центрах граней. Перовскит — простейшая из структур, в которых обычно обнаруживается сегнетоэлектрическое поведение. Поскольку атомов водорода здесь нет, поляризация должна возникать вследствие относительного смещения подрешеток положительных и отрицательных ионов.

Первоначально подробности об этих смещениях не были известны. Их природу удалось выяснить путем исследования дифракции нейтронов [15]. При температурах ниже критической ионы кислорода смещаются в направлении [100], а ионы титана и бария — в противоположном направлении. Ионы разного типа испытывают различные смещения, но в целом имеет место относительное перемещение положительных и отрицательных ионов. Смещения ионов показаны на фиг. 8.7.

¹⁾ См. ссылки в конце главы.

²⁾ См. также [20]. — Прим. ред.

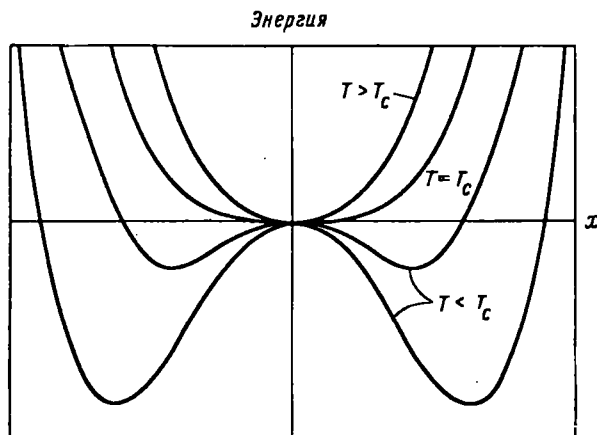
Подробная теория этого явления пока не развита. Однако основные его черты были объяснены в работах Девоншира и автора¹⁾, выполненных еще до опытов с рассеянием нейтронов. В частности, автор настоящей книги исследовал влияние поправки Лорентца и электронной поляризуемости на усиление поляризации, обусловленной движением ионов. За неимением более достоверных сведений предполагалось, что это движение заключается в перемещении ионов титана относительно ионов кислорода. Такое предположение, хотя оно оказалось и не совсем точным, может служить довольно разумным первым приближением. Учет поправки Лорентца приводит к сложной ситуации, поскольку поляризация ионов каждого типа вызывает электрическое поле, действующее на все ионы. Тем не менее удалось показать, что для иона титана эффективная поправка Лорентца примерно в 3 раза больше своего стандартного значения. Это связано с присутствием ионов кислорода над и под ионом титана (см. фиг. 8.7).

Приближенно можно положить $b=3$ в формуле (8.23). Диэлектрическая проницаемость κ_{∞} титаната бария при высоких частотах приблизительно равна 5,76. Следовательно, фактор усиления по порядку величины равен $3 \cdot 5,76 = 17,3$. В действительности было получено несколько меньшее значение. Все же оно достаточно велико, чтобы придать разумный смысл предположению о возможности довести сравнительно малую величину ($Ne^2/m\epsilon_0$) до значения, при котором может скомпенсироваться ω_0^2 . Хотя в настоящее время ничего нельзя сказать о точности данного расчета, тем не менее он указывает на важную роль рассмотренного в этом параграфе пути усиления эффекта поляризации. Из расчета следует, что диэлектрическая проницаемость может оказаться очень большой, несмотря на то, что поляризуемости отдельных ионов имеют нормальную величину.

Перейдем теперь к объяснению температурной зависимости диэлектрической проницаемости при температурах выше критической [см. формулу (8.24)], а также рассмотрим факторы, ограничивающие поляризацию при температурах ниже критической. Если поляризуемость кристалла бесконечна, то почему ионы не смещаются бесконечно далеко? Согласно цитированным выше работам автора и Девоншира, причина состоит в том, что при интересующих нас сейчас больших смещениях возвращающая сила, которая действует на ионы, оказывается нелинейной. Допустим, что в выражении для энергии, кроме квадратичного члена, соответствующего линейной силе, имеется еще слагаемое с четвертой степенью смещения. Тогда для зависимости энергии

¹⁾ См. работы [1764—1767, 4353] в библиографии в конце книги.

сегнетоэлектрика от смещения ионов при различных температурах получится семейство кривых, подобное изображенному на фиг. 8.8. Здесь мы слишком упростили задачу, предположив, что при критической температуре линейная возвращающая сила обращается в нуль; однако более детальное исследование задачи методами статистической механики показывает, что по существу эта картина все же правильна. Как видно, при темпера-

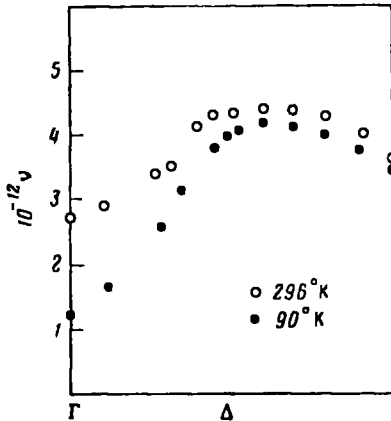


Фиг. 8.8. Зависимость энергии сегнетоэлектрика от смещения ионов (схематически).

Энергия предполагается пропорциональной $ax^2 + bx^4$, где a — функция от температуры, обращающаяся в нуль при критической температуре и отрицательная при температурах ниже критической. Два минимума при $T < T_c$ отвечают двум возможным устойчивым положениям, соответствующим постоянным дипольным моментам, направленным в противоположные стороны.

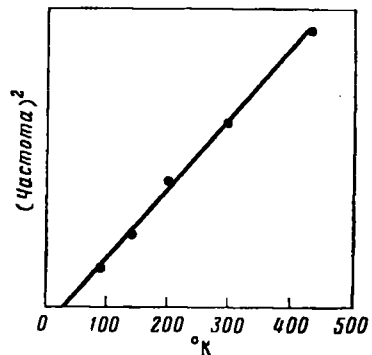
туре выше критической возвращающая сила с понижением температуры становится все меньше и меньше. При температуре ниже критической наличие членов четвертой степени в выражении для энергии приводит к появлению двух минимумов. В присутствии внешнего поля один из них лежит ниже другого, и ионы располагаются именно в нем, что и приводит к наблюдаемой постоянной поляризации. При рассмотрении задачи методами статистической механики оказывается, что член четвертой степени в выражении для энергии приводит к медленной зависимости величины ω_0 от температуры. Грубо говоря, при высоких температурах амплитуда колебаний увеличивается и член четвертой степени возрастает. Это приводит к увеличению возвращающей силы и тем самым к увеличению частоты ω_0 . Если другое слагаемое в выражении (8.22), обусловленное поправкой

Лорентца, не зависит от температуры, то может оказаться, что величина ω_T^2 невелика и положительна при высоких температурах, невелика по модулю и отрицательна при низких температурах и обращается в нуль при критической температуре. Другими словами, при нулевой частоте ($\omega = 0$) знаменатель резонансного члена в (8.20) в первом приближении будет пропорционален $T - T_c$, что и приводит к соотношению (8.24).



Фиг. 8.9. Зависимость частоты поперечных оптических колебаний от волнового числа для титаната стронция при двух значениях температуры: 296 и 90° К.

Видно уменьшение частоты ω_T при понижении температуры сегнетоэлектрика до критического значения T_c [16].



Фиг. 8.10. Температурная зависимость квадрата частоты поперечных оптических колебаний, отвечающей нулевому волновому числу (титанат стронция).

При критической температуре частота обращается в нуль [16].

Мы не будем здесь вдаваться в подробности теории сегнетоэлектричества, к которой еще вернемся в следующей главе. Подробности читатель может найти в многочисленных обзорных статьях. Отметим, однако, один результат, который был проверен экспериментально. Это обращение в нуль частоты ω_T при критической температуре. Такая проверка (но не для титаната бария BaTiO_3 , а для сходного с ним титаната стронция SrTiO_3 , также сегнетоэлектрика) была выполнена Каули [16]. Последний изучал поведение поперечных оптических колебаний в титанате стронция при понижении температуры до критической точки, которая для этого кристалла лежит при 32° К. Резкое уменьшение частоты рассматриваемых колебаний при понижении температуры видно из фиг. 8.9, где показана зависимость $\omega(|k|)$ при 90 и 296° К. Эти результаты можно интерпретировать

с помощью фиг. 8.4. При температуре, близкой к критической, зависимость $\omega(|\mathbf{k}|)$ для электромагнитной волны имеет вид уже не почти вертикальной прямой, а кривой, начальный наклон которой соответствует скорости, более близкой к скорости звука, чем к скорости света. Эта кривая переходит в кривую для упругих колебаний уже не при малых $|\mathbf{k}|$ (или $|\mathbf{q}|$), а при значениях волнового вектора, вполне сравнимых с линейными размерами зоны Бриллюэна. На фиг. 8.10 показана температурная зависимость квадрата частоты поперечных оптических колебаний [16]. Поскольку можно ожидать, что величина ω_T^2 , определяемая равенством (8.22), будет пропорциональна $T - T_c$, Каули построил график температурной зависимости не самой частоты, а ее квадрата и получил приблизительно прямую линию.

Мы изложили здесь лишь некоторые элементы теории сегнетоэлектричества. Очевидно, однако, что в принципе должно быть возможно найти закон сил взаимодействия между ионами. Зная его, мы смогли бы построить фундаментальную теорию колебаний решетки и вычислить из нее кривые $\omega(|\mathbf{k}|)$. На фиг. 8.2 была изображена такая теоретически вычисленная кривая для иодистого натрия, и мы обещали изложить в дальнейшем метод расчета. Обещание будет выполнено в следующей главе. При этом придется возвратиться к оригинальной теории Борна — Кармана, а также и к другой работе Борна. Действительно, последний ясно понимал (мы ожидаем этого и от читателя), что для построения удовлетворительной теории колебаний решетки необходимо более подробно исследовать характер сил, действующих между ионами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Woods A. D. B., Brockhouse B. N., March R. H., Stewart A. T., Bowers R., Phys. Rev., 128, 1112 (1962).
2. Woods A. D. B., Brockhouse B. N., March R. H., Stewart A. T., Bowers R., Proc. Phys. Soc., 79, 440 (1962).
3. Woods A. D. B., Cochran W., Brockhouse B. N., Phys. Rev., 119, 980 (1960).
4. Brockhouse B. N., Iyengar P. K., Phys. Rev., 111, 747 (1958).
5. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 2. Symmetry and Energy Bands in Crystals, New York, 1965.
6. Борн М., Хуанг К., Dynamical Theory of Crystal Lattices, New York, 1954. (См. перевод: М. Борн, Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллической решетки, ИЛ, 1958.)
7. Huang K., Nature, 167, 779 (1951).
8. Huang K., Proc. Roy. Soc., A208, 352 (1951).
9. Lyddane R. H., Herzfeld K. F., Phys. Rev., 54, 846 (1938).
10. Lyddane R. H., Herzfeld K. F., Sachs R. G., Phys. Rev., 58, 1008 (1940).
11. Lyddane R. H., Sachs R. G., Teller E., Phys. Rev., 59, 673 (1941).
12. Fröhlich H., Mott N. F., Proc. Roy. Soc., A171, 496 (1939).
13. Cochran W., Phys. Rev. Lett., 3, 412 (1959).
14. Hilsch R., Pohle R. W., Zs. Phys., 59, 812 (1930).

15. Frazer B. C., Danner H. R., Pepinsky R., Phys. Rev., **100**, 745 (1955).
 16. Cowley R. A., Phys. Rev. Lett., **9**, 159 (1962).
 17. Shirane G., Jona F., Pepinsky R., Proc. IRE, **43**, 1738 (1955).
 18*. Джонс Г., Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах, изд-во «Мир», 1968.
 19*. Киттель Ч., Квантовая теория твердых тел, изд-во «Наука», 1967.
 20*. Бокии Г. Б., Введение в кристаллохимию, М., 1954.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

к § 1

Тепловое диффузное рассеяние рентгеновских и световых лучей: [928, 983—986, 1144, 1145, 1169, 1170, 241, 213—216, 1491—1493, 1520, 1592, 1612—1615, 1665, 1666, 1682, 1683, 292, 298, 299, 366, 367, 2570, 2571, 2585, 2683, 2684, 520—522, 2737, 2816, 3088, 3090, 3092, 3094, 3144, 602—605, 3188, 632—637, 3779, 3780, 3829, 3830, 3880, 3977, 3990, 4015, 4039, 4201, 755, 4371, 4581, 4735, 4768—4770, 4774, 4775, 886—888, 893—895].

Исследование спектров упругих колебаний методом рассеяния нейтронов: [1064—1067, 1367—1381, 1454, 1518, 1519, 1811, 1817, 1942, 2248, 2624, 3088, 3090, 3092, 3094, 3344, 3806, 3862, 3863, 3958, 4173, 4345, 4449, 4493, 4593, 4746].

к § 5

Дигидрофосфат калия: [862, 784, 2101, 3874, 3274, 3857, 1064, 1067].

Структура перовскита: [1764—1767, 4353, 2102, 4286—4288, 1584].

Сегнетоэлектричество: [933, 935—938, 943, 1064, 1067, 1123, 1153, 1259, 1523, 1582, 1584, 1587, 1657, 1661, 1667, 1764—1767, 1872, 2015, 2098, 2101, 2102, 2265, 2466, 2653, 2674, 2675, 2705, 2708, 2721, 2745, 2746, 2881, 2884—2886, 2902, 2903, 2968, 2969, 3063—3067, 3181, 3229, 3246, 3274, 3387, 3389, 3390, 3509, 3511, 3530, 3552, 3597, 3683, 3692, 3699, 3716, 3857, 3872, 3874, 3956, 4019, 4038, 4092, 4202, 4237, 4263, 4286—4288, 4324, 784, 4353, 4383—4386, 4582, 4592, 4694, 862, 4830, 4831, 4932, 4933].

Колебания решетки: [945, 946, 970, 994, 1024, 1028, 1039, 1058, 1069, 1083, 1092, 1095, 1107, 1117—1119, 149, 1128, 1131—1133, 1149, 1150, 1176, 1190, 1214, 1215, 1222, 1223, 1232, 1233, 1236, 159—166, 169, 1240—1246, 1273, 1293, 1322, 186—188, 197—201, 206, 218, 250—252, 1332, 1365, 1401, 1404, 1433, 1434, 1444—1446, 1525, 1536, 1566, 1567, 1577—1591, 1593, 1609, 1610, 1624, 1654—1661, 1668—1671, 1709—1721, 289, 290, 1739—1742, 1746, 1751—1754, 1769, 1770, 1794, 1813, 1817, 1819—1826, 1877, 1878, 1880, 1904, 1905, 1922, 320, 323, 325, 331, 1944, 1982, 1983, 355, 2014, 379, 2070, 2071, 2074, 2086, 2087, 2099, 395, 2153, 425, 426, 2188, 2189, 2215, 2242, 2244, 2254, 2362, 2372, 2376, 2392, 2401, 2408, 2425, 2439, 2452, 2453, 2467—2470, 2504, 2515, 2546, 2548, 2558, 2559, 2562, 2572, 2573, 2576, 2577, 2581, 2586—2592, 2594—2596, 2607, 2609, 2611—2613, 2626, 2635, 2654, 517, 519, 2703, 2704, 2733, 2735, 2745, 2802, 2807, 2808, 2814, 2815, 2817, 2823, 557, 558, 2901, 2924, 2928, 2929, 2934—2944, 2985, 3029, 3063—3067, 3075—3087, 3089, 3091, 3093, 3104, 3106, 3117, 3119, 3183—3187, 3189, 3211—3215, 3221, 3225, 3232—3234, 606, 3245, 3249, 3253—3256, 3259, 3278, 3281, 3284, 3288, 3290, 3291, 3314—3317, 3331, 3332, 3337, 3344, 3360, 3366—3368, 643—646, 3398, 3467, 3468, 3470, 3492, 3501—3504, 3506, 3507, 3545, 3556, 3558, 3564, 3565, 3578, 3591, 3596, 3599, 3606, 3607, 3613—3615, 3701, 3704, 3718, 3720—3722, 3728, 3730, 3757, 3758, 3764, 3779, 3780, 3804, 3867—3870, 3887, 3888, 3890, 3905, 3957, 3966, 3973, 3980, 4032, 4037, 4038, 4040, 4086, 4103, 4133, 4145—4147, 4150—4155, 752, 4183, 4185, 4196, 4201, 4202, 4213, 760, 761, 4262, 4279, 4280, 4283, 4328, 4331, 4342, 4344, 4347, 4356, 4363—4366, 4378, 4389, 4412, 4447, 4548, 4555, 4570—4574, 4609, 4614, 4617, 4618, 4641, 4652—4657, 4677, 4715, 4717, 4729, 4751, 4779, 4783, 4786, 4789—4793, 4813—4815, 4827, 864, 4858, 4864—4868, 4901, 4904, 4908, 4919, 4966—4968].

ЭНЕРГИЯ РЕШЕТКИ ИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

§ 1. Полная энергия кристалла

Почти сразу же после появления метода дифракции рентгеновских лучей, предложенного в 1912 г. Лауэ и Брэггами, была определена структура хлористого натрия NaCl. Вполне естественно, это повлекло за собой попытки объяснить статические и динамические свойства данного кристалла. Было очевидно, что кристалл построен из ионов Na^+ и Cl^- , которые должны притягиваться друг к другу кулоновскими силами. Поскольку потенциальная энергия взаимного притяжения любой пары ионов обратно пропорциональна расстоянию между ними, она тем самым должна быть обратно пропорциональна постоянной решетки a . Следовательно, полная кулоновская энергия также должна быть пропорциональна $1/a$ (под постоянной решетки a мы понимаем ребро куба объемноцентрированной кубической структуры хлористого натрия). Поскольку каждый ион окружен ионами противоположного знака плотнее, чем ионами своего знака, результатом кулоновского взаимодействия будет притяжение, энергия которого пропорциональна $-1/a$. Определение постоянного множителя представляет собой довольно трудную задачу, впервые решенную Маделунгом^[1]; мы рассмотрим ее в § 3. Пока же будем просто представлять часть потенциальной энергии, соответствующей притяжению, в виде $-A/a$.

В отсутствие прочих сил кристалл, разумеется, сжимался бы и его энергия достигала бы минимума при $a=0$. С самых разных точек зрения очевидно, однако, что на малых расстояниях между ионами должны действовать силы взаимного отталкивания, препятствующие этому сжатию. Существование указанных сил подтверждается, в частности, тем, что ионы в кристалле NaCl обладают той же электронной структурой, что и атомы инертных газов, а из уравнения состояния последних следует, что на малых расстояниях их атомы отталкиваются. Разумеется, в те времена, когда появилась рассматриваемая теория, теория периодической системы элементов еще не была построена; не существовало четкого представления об электронных оболочках в атомах и соответственно не было и современной ясной картины электронного строения атомов инертных газов. Тем не

менее общая идея об устойчивости атомов инертных газов уже существовала.

Борн и Ланде [2, 3]¹⁾ задались целью описать это отталкивание. Поскольку ни одна из существовавших тогда теорий не позволяла явно найти аналитический вид энергии отталкивания, указанные авторы попытались найти эмпирическое выражение функции, которая обладала бы нужным поведением, т. е. очень быстро возрастала по мере уменьшения расстояния между атомными ядрами. Одна из простейших функций такого типа — обратная степенная $1/r^n$. Если для каждой пары ионов, отстоящих друг от друга на расстоянии r , потенциальная энергия отталкивания ведет себя как $1/r^n$, то сумма всех таких членов будет пропорциональна $1/a^n$. Постоянный множитель, входящий в выражение для полной энергии, легко найти, если он известен для пары ионов. Действительно, при больших n силы отталкивания между удаленными друг от друга ионами очень малы и потому сумма энергий отталкивания между отдельными ионами, равная полной энергии отталкивания, сходится очень быстро. В связи с этим Борн и Ланде постулировали, что полную энергию отталкивания можно записать в виде B/a^n . В качестве n они принимали большие целые числа. С помощью рассуждений, основанных на электростатической модели атома, которая в те времена широко применялась в химии, они получили значение $n=9$ для всех щелочногалоидных кристаллов, кроме солей лития; для последних оказалось, что $n=5$. Теоретическое обоснование этих значений в настоящее время нельзя признать справедливым, но сами числа довольно близки к результатам наиболее точных измерений.

Взяв за основу такой вид энергии взаимодействия между ионами, Борн, Ланде, Маделунг и другие авторы²⁾ начиная с 1918 г. провели подробное исследование статических свойств ионных, в частности щелочногалоидных, кристаллов. Они рассматривали кристалл со структурой хлористого натрия, но с переменным периодом решетки a , т. е. кристалл переменного объема. Зная зависимость энергии от объема, можно предсказать значения ряда наблюдаемых величин. Можно ожидать, что зависимость энергии от расстояния между атомами будет примерно такой же, как и зависимость энергии двухатомной

¹⁾ См. также библиографию в конце книги.

²⁾ См. в библиографии в конце книги статьи указанных авторов, а также работы [329, 332—356, 481—484, 506—510, 643—645, 656—662, 710, 711, 739, 767, 768, 771—785, 794, 812, 813, 848—853], выполненные до второй мировой войны. В некоторых из этих работ, кроме рассмотренных членов, учитывалось и вандерваальсово притяжение между ионами (см. приложение 5). Оказалось, что оно довольно существенно.

молекулы от расстояния между ядрами (см., например, [4]). Как и в случае двухатомной молекулы, энергия будет иметь минимум, соответствующий равновесным положениям атомов или ионов. Размеры кристалла (которые, конечно, можно определить методом дифракции рентгеновских лучей) будут определяться расстоянием между ядрами атомов в состоянии с минимальной энергией. Энергия, необходимая для диссоциации кристалла, равна разности между минимальной энергией и значением, соответствующим бесконечному межатомному расстоянию. Эти значения энергии диссоциации известны из термодимических измерений.

Помимо двух указанных наблюдаемых величин, можно также получить представление о зависимости энергии от межатомного расстояния вблизи минимума. Именно можно измерить сжимаемость кристалла и ее изменение с давлением. Для многих веществ зависимость объема (или межатомного расстояния) от давления известна в очень широком диапазоне давлений. Пользуясь ею, можно в столь же широкой области определить зависимость энергии от межатомного расстояния¹⁾.

Несмотря на то что рассматриваемая теория энергии связи ионных кристаллов содержала ряд упрощающих допущений, она все же имела весьма значительный успех. Дело в том, что основной вклад в энергию связи таких кристаллов дает электростатическое притяжение между разноименно заряженными ионами. Это чисто классический эффект, для понимания которого не требуется привлечения квантовой механики. Другой член в выражении для энергии, описывающий отталкивание между ионами на малых расстояниях, был введен эмпирически. Его можно было довольно точно определить из опытных данных и затем использовать для предсказания новых эффектов. Лишь впоследствии этот эмпирический подход уступил место квантовомеханической теории, которая объяснила природу связи в ионных кристаллах, не прибегая к эмпирическим величинам. Мы изложим ее в § 6. В квантовой теории вычисляется полная энергия кристалла как функция положений атомных ядер. Затем по теореме Борна — Оппенгеймера ее можно рассматривать как потенциальную энергию ядер.

Теории рассматриваемого типа, как в раннем, классическом, так и в более позднем квантовомеханическом варианте, служат для описания не только статических, но и динамических свойств кристаллической решетки, например в задаче о колебаниях атомов, с которой мы встречались в предыдущих главах. Эта

¹⁾ Подробную трактовку этого вопроса можно найти в книге [31], гл. 13 (см. также [35]). — *Прим. ред.*

проблема гораздо сложнее, чем в случае двухатомной молекулы. Кристалл можно деформировать не только путем растяжения или сжатия его как целого с сохранением прежней геометрии, но и путем смещения какого-либо атома или иона из его положения равновесия. Таким образом, кристалл имеет $3N$ степеней свободы, которым соответствуют $3N$ нормальных колебаний. Последние образуют упругий спектр кристалла, рассмотренный в предыдущих главах. При любой температуре выше абсолютного нуля различным нормальным колебаниям будут соответствовать разные степени возбуждения. Упругим спектрам было посвящено большое число исследований как на основе классической теории типа теории Борна—Ланде, так и с помощью более тонких методов, которые мы рассмотрим в § 5. Тем не менее до сих пор еще нет вполне удовлетворительной динамической теории решетки, основанной на чисто квантовомеханической модели кристалла.

§ 2. Теория Борна, Ланде и Маделунга

Как уже упоминалось в предыдущем параграфе, согласно гипотезе Борна, Ланде и Маделунга, полная энергия щелочно-галогидного кристалла равна

$$E = -\frac{A}{a} + \frac{B}{a^n}, \quad (9.1)$$

где a — постоянная решетки, A , B и n — константы. Первый член отвечает кулоновскому притяжению между ионами, второй — отталкиванию ионных остовов. С помощью этой формулы можно вычислить различные упомянутые выше величины. Прежде всего выразим энергию E не через a , а через объем. Пусть объем куба с ребром a равен V и E есть энергия кристалла в этом объеме. Тогда $V = a^3$ и

$$E = -\frac{A}{V^{1/3}} + \frac{B}{V^{n/3}}. \quad (9.2)$$

Давление p определяется термодинамическим соотношением $dE = -p dV$, так что $p = -dE/dV$. Поэтому

$$p = -\frac{dE}{dV} = -\frac{1}{3} \frac{A}{V^{4/3}} + \frac{n}{3} \frac{B}{V^{(n+3)/3}}. \quad (9.3)$$

В равновесной конфигурации при абсолютном нуле температуры давление равно нулю. Полагая в (9.3) $p = 0$, находим

$$\frac{B}{A} = \frac{1}{n} V_0^{(n-1)/3}, \quad (9.4)$$

где V_0 — равновесный объем.

Определим теперь производную dp/dV , необходимую для определения сжимаемости. Она равна

$$\frac{dp}{dV} = \frac{4}{9} \frac{A}{V^{1/3}} - \frac{n}{3} \left(\frac{n}{3} + 1 \right) \frac{B}{V^{(n+6)/3}}. \quad (9.5)$$

Сжимаемость определяется соотношением $\chi_0 = -(1/V_0) \times X(dV/dp)_0$; здесь мы будем вычислять ее при нулевом давлении, поэтому значения величин dV/dp и V_0 также следует брать для нулевого давления. Для этого подставим отношение B/A из (9.4) в формулу (9.5). Аналогично, подставляя B/A в формулу (9.1), находим энергию связи E_0 при нулевом давлении. В результате получим

$$E_0 = - \frac{A}{V_0^{1/3}} \left(1 - \frac{1}{n} \right), \quad (9.6)$$

$$\chi_0 = \frac{9V_0^{4/3}}{A(n-1)}. \quad (9.7)$$

Отсюда следует, что если определить объем V_0 из эксперимента, вычислить константу A (см. следующий параграф) и задать некоторое значение n , как это сделали Борн и Ланде, то можно найти энергию связи и сжимаемость. Борн и Ланде провели такой расчет и показали, что он удивительно хорошо согласуется с опытом. Еще разумнее было бы рассматривать n как эмпирически определяемую величину (названные авторы поступали и так). Взяв значение сжимаемости из опыта, Борн и Ланде вычислили n по формуле (9.7). При этом в соответствии с ранее сделанными предположениями оказалось, что $n \approx 5$ для солей лития и $n \approx 9$ для остальных щелочногалоидных кристаллов. Эти значения можно было подставить в формулу (9.6) и вычислить энергию связи. Результаты совпали с экспериментальными значениями с точностью до нескольких процентов. Отметим, что первый член в формуле (9.6) соответствует электростатическому притяжению, а второй, в n раз меньший, — отталкиванию. Поскольку число n велико, всякая ошибка при описании отталкивания приведет лишь к малому изменению энергии связи, в чем, несомненно, и кроется причина хорошего совпадения теории с опытом.

Автор настоящей книги [5] сделал попытку провести более детальное сравнение теории с экспериментом. Он измерил сжимаемости большего числа щелочногалоидных кристаллов, чем это было сделано раньше, и одновременно нашел из опыта изменение сжимаемости с давлением, которое определяется производной d^2p/dV^2 . Последнюю величину можно вычислить с помощью модели Борна — Ланде; как и сжимаемость (9.7), она

оказывается зависящей от V_0 , A и n . При попытке сравнить опытные данные с теорией здесь получаются значения n , не совпадающие с теми, которые следуют из измерений сжимаемости. Другими словами, предположение, что энергия отталкивания пропорциональна $1/r^n$, не вполне согласуется с фактами.

Впоследствии Борн и Майер [6] предложили описывать энергию отталкивания не степенным выражением $(1/r^n)$, а экспоненциальным e^{-ar} . Это предложение появилось после того, как с помощью квантовой механики было показано, что отталкивание между электронными оболочками инертных газов приближенно описывается экспонентой такого вида. Экспоненциальная функция (параметры которой также определяются по сжимаемости) дает гораздо лучшее описание зависимости энергии отталкивания от межатомного расстояния, чем первоначально введенная Борном и Ланде зависимость вида $1/r^n$; в настоящее время она используется во всех случаях, когда требуется простая аналитическая формула для энергии отталкивания в кристаллах рассматриваемого типа.

Следует сделать одно замечание относительно энергии связи, определенной методом Борна — Ланде. Она представляет собой разность энергии кристалла в равновесном состоянии и суммарной энергии отдельных ионов. Однако при изучении молекул [4] энергия связи определяется как разность энергии молекулы в равновесном состоянии и суммарной энергии отдельных нейтральных атомов. Эта величина гораздо меньше энергии, определенной методом Борна — Ланде. Например, в случае гидрида лития LiH (см. [4], фиг. 7.4) кривая энергии ионного состояния $\text{Li}^+ + \text{H}^-$ лежит значительно выше кривой состояния $\text{Li} + \text{H}$ для отдельных атомов. Оба эти определения совершенно справедливы при условии, что мы понимаем смысл наших действий. Естественно, однако, что довольно малая абсолютная ошибка, допускаемая при расчете методом Борна — Ланде, приводит к гораздо меньшей относительной погрешности, когда энергия связи вычисляется по отношению к совокупности бесконечно удаленных ионов, а не атомов. С ошибками, возникающими при вычислении энергии связи молекул [4], нужно сравнивать погрешности, вычисленные по отношению к суммарной энергии отдельных атомов.

§ 3. Электростатическая энергия и задача Маделунга

Как уже упоминалось, задача о вычислении постоянной A [в формуле (9.1)], определяющей энергию притяжения ионов в кристалле, равную $-A/a$, была решена Маделунгом. Это важная и интересная проблема, возникающая всякий раз, когда

мы пытаемся определить энергетические характеристики ионных кристаллов, например зонную структуру щелочногалогидных кристаллов. Поскольку эта проблема встречается в теории твердого тела в различных формах, мы рассмотрим ее здесь более подробно. Прежде всего напомним, что электростатическая потенциальная энергия системы зарядов q_i определяется выражением

$$E_{эл} = \sum_i \frac{1}{2} q_i V_i, \quad (9.8)$$

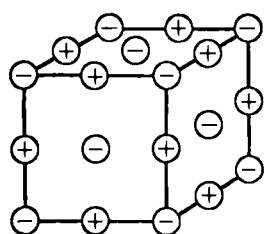
где V_i — электростатический потенциал в точке, где находится i -й заряд, создаваемый всеми остальными зарядами. Выражение (9.8) эквивалентно следующему:

$$E_{эл} = \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}. \quad (9.9)$$

Здесь r_{ij} — расстояние между i -м и j -м зарядами; мы пользуемся гауссовой системой единиц. Потенциал V_i равен

$$V_i = \sum_{j \neq i} \frac{q_j}{r_{ij}}. \quad (9.10)$$

Фиг. 9.1. Ионы на гранях, ребрах и в вершинах куба структуры NaCl (к вычислению постоянной Маделунга по методу Эвжена).



Множитель $1/2$ введен в выражение (9.8) в связи с тем, что, комбинируя (9.8) и (9.10), чтобы получить формулу (9.9), мы придем к двойной сумме по индексам i и j . Это дает удвоенную сумму по парам (ij) . Лишний множитель 2 как раз и компенсируется множителем $1/2$ в формуле (9.8).

Для вычисления электростатической энергии ионного кристалла, построенного из точечных ионов, необходимо найти потенциал, создаваемый всеми остальными ионами в месте нахождения данного иона. При этом в сумму (9.10), разумеется, не включаются бесконечно большие слагаемые с $j = i$. Эта задача отнюдь не тривиальна. В случае хлористого натрия каждый положительный ион окружен шестью отрицательными ионами, отстоящими от него на расстоянии $a/2$, 12 положительными ионами на расстоянии $a\sqrt{2}/2$ и т. д. В более общем случае ионы будут располагаться относительно данного иона в точках с координатами $x = n_1 a/2$, $y = n_2 a/2$, $z = n_3 a/2$, где n_1, n_2, n_3 — произвольные положительные или отрицательные целые числа. Если сумма $n_1 + n_2 + n_3$ четна, то соответствующий ион будет положительным, если нечетна — отрицательным. В табл. 9.1 приведены расстояния, числа соседних ионов на

этих расстояниях и вклад этих ионов в потенциальную энергию для всевозможных комбинаций чисел n от 0 до 3.

Таблица 9.1

Расчет электростатической энергии для структуры хлористого натрия

n_1, n_2, n_3	Число соседних ионов	Расстояние	Вклад в потенциальную энергию
100	6	$(a/2) \sqrt{1}$	$(e^2/a) \times (-6) \times (2/\sqrt{1}) = -12,000000$
110	12	$(a/2) \sqrt{2}$	$(e^2/a) \times (12) \times (2/\sqrt{2}) = 16,970563$
111	8	$(a/2) \sqrt{3}$	$(e^2/a) \times (-8) \times (2/\sqrt{3}) = -9,237604$
200	6	$(a/2) \sqrt{4}$	$(e^2/a) \times (6) \times (2/\sqrt{4}) = 6,000000$
210	24	$(a/2) \sqrt{5}$	$(e^2/a) \times (-24) \times (2/\sqrt{5}) = -21,466252$
211	24	$(a/2) \sqrt{6}$	$(e^2/a) \times (24) \times (2/\sqrt{6}) = 19,595918$
220	12	$(a/2) \sqrt{8}$	$(e^2/a) \times (12) \times (2/\sqrt{8}) = 8,485282$
221	24	$(a/2) \sqrt{9}$	$(e^2/a) \times (-24) \times (2/\sqrt{9}) = -16,000000$
222	8	$(a/2) \sqrt{12}$	$(e^2/a) \times (8) \times (2/\sqrt{12}) = 4,618802$
300	6	$(a/2) \sqrt{9}$	$(e^2/a) \times (-6) \times (2/\sqrt{9}) = -4,000000$
310	24	$(a/2) \sqrt{10}$	$(e^2/a) \times (24) \times (2/\sqrt{10}) = 15,178933$
311	24	$(a/2) \sqrt{11}$	$(e^2/a) \times (-24) \times (2/\sqrt{11}) = -14,472544$
320	24	$(a/2) \sqrt{13}$	$(e^2/a) \times (-24) \times (2/\sqrt{13}) = -13,312800$
321	48	$(a/2) \sqrt{14}$	$(e^2/a) \times (48) \times (2/\sqrt{14}) = 25,657079$
322	24	$(a/2) \sqrt{17}$	$(e^2/a) \times (-24) \times (2/\sqrt{17}) = -11,641710$
330	12	$(a/2) \sqrt{18}$	$(e^2/a) \times (12) \times (2/\sqrt{18}) = 5,656854$
331	24	$(a/2) \sqrt{19}$	$(e^2/a) \times (-24) \times (2/\sqrt{19}) = -11,011955$
332	24	$(a/2) \sqrt{22}$	$(e^2/a) \times (24) \times (2/\sqrt{22}) = 10,233635$
333	8	$(a/2) \sqrt{27}$	$(e^2/a) \times (-8) \times (2/\sqrt{27}) = -3,079201$

Очевидно, что, продолжая эту таблицу до бесконечности, мы получаем осциллирующий ряд, члены которого если и убывают, то очень медленно, так что совершенно нерационально пытаться вычислить сумму путем непосредственного суммирования. Эвжен [7] предложил способ улучшения сходимости. Идея состоит в том, чтобы построить куб, грани которого совпадают с атомными плоскостями (фиг. 9.1), и по-особому считать ионы. На самом деле, пусть рассматриваемому кубу принадлежит половина каждого иона, расположенного на грани куба, четверть каждого иона, расположенного на ребре, и одна восьмая часть каждого иона, находящегося в вершине куба. При этом полный заряд куба равен нулю. Если расширить куб, сдвигая

каждую его грань на $a/2$, то полный заряд добавочного объема будет также равен нулю и потому этот объем будет давать очень малый вклад в полный потенциал, создаваемый в начале координат. Другими словами, полная потенциальная энергия взаимодействия иона, расположенного в начале координат, со всеми ионами рассматриваемого куба должна довольно быстро сходиться при возрастании размеров куба.

Именно так дело и обстоит. Если куб вдоль каждой из осей занимает область от $-a/2$ до $a/2$, то точки (100) будут принадлежать кубу наполовину, точки (110) — на одну четверть и точки (111) — на одну восьмую. Вклад ионов, расположенных в этих точках, в потенциальную энергию равен (в единицах e^2/a)

$$-\frac{12,000000}{2} + \frac{16,970563}{4} - \frac{9,237604}{8} = -2,912060. \quad (9.11)$$

Пусть теперь куб вдоль каждой оси занимает область от $-a$ до a . Тогда точки (100), (110) и (111) будут принадлежать ему целиком, точки (200), (210) и (211) — наполовину, точки (220), (221) — на одну четверть и (222) — на одну восьмую. Следовательно, для потенциальной энергии мы получим (в единицах e^2/a)

$$\begin{aligned} & -12,000000 + 16,970563 - 9,237604 + \frac{1}{2}(6,000000 - \\ & -21,466252 + 19,595918) + \frac{1}{4}(8,485282 - 16,000000) + \\ & + \frac{1}{8}4,618802 = -3,503538. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Аналогично если область, занятая кубом, простирается от $-3a/2$ до $3a/2$, то потенциальная энергия становится равной $-3,494078$. Видно, что эти числа образуют сходящуюся последовательность, причем напрашивается предположение, что истинный ответ лежит где-то между $-3,503538$ и $-3,494078$. Это предположение оказывается правильным. Принятое ныне значение рассматриваемой величины, обычно называемой постоянной Маделунга, составляет $-3,495129$ (с точностью до шести десятичных знаков)¹⁾. Видно, однако, что даже при ускорении сходимости по методу Эвжена непосредственное суммирование не очень удобно для вычисления постоянной Маделунга. Полное число соседних ионов, учтенных при составлении табл. 9.1, равно 342. Чтобы получить результат с шестью десятичными знаками, следует принять во внимание гораздо большее число соседних ионов.

¹⁾ Ранее [8, 9] было получено несколько менее точное значение.

В следующем параграфе будет изложен метод вычисления постоянной Маделунга, предложенный Эвальдом [10] и часто используемый для решения задач такого рода. Метод Эвальда, в основе которого лежат вычисления, приведенные в гл. 4, § 3, позволяет найти потенциал не только в узлах решетки, но и внутри элементарной ячейки (что иногда необходимо). Если вычислять потенциал внутри ячейки методом Эвжена, то упомянутые 342 соседних иона будут вносить различный вклад, что значительно усложнит расчеты. Несмотря на довольно медленную сходимость метода Эвжена, он все же удобен для первого приближенного изучения новой кристаллической структуры. Постоянные Маделунга были вычислены для большого количества структур. Во многих случаях в ходе предварительного изучения использовался метод Эвжена, а для окончательного расчета — метод Эвальда. Имеется, однако, и ряд других методов расчета. В частности, новые методы были развиты и исследованы в работах [8, 9].

Прежде чем перейти к изложению метода Эвальда, воспользуемся приведенным выше значением постоянной Маделунга для вычисления константы A в формуле (9.1). Кубическая элементарная ячейка гранецентрированной кубической структуры с ребром, равным a , содержит по четыре иона каждого типа. Поэтому, произведя в (9.8) суммирование по элементарной ячейке, мы получим четыре члена для положительных ионов и четыре — для отрицательных. Все эти восемь членов будут равны между собой, поскольку потенциалы в точках расположения отрицательного и положительного ионов одинаковы по величине и противоположны по знаку. Таким образом, электростатическая энергия, приходящаяся на кубическую элементарную ячейку с ребром a , составляет (в гауссовых единицах)

$$E_{эл} = \frac{8}{2} \frac{e^2}{a} (-3,495129) = -13,980516 \frac{e^2}{a}. \quad (9.13)$$

Если выразить a в боровских радиусах a_0 , то электростатическая энергия будет иметь вид

$$-\frac{13,980516}{a/a_0} \frac{e^2}{a_0}.$$

Поскольку энергия e^2/a_0 равна 2 *ридберг*, или одной атомной единице Хартри, то

$$\begin{aligned} E_{эл} &= -13,980516 \frac{1}{a/a_0} \text{ единиц Хартри} = \\ &= -13,980516 \frac{2}{a/a_0} \text{ ридберг}. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Постоянная a здесь выражена в атомных единицах, т. е. соответствует a/a_0 в прежних единицах.

§ 4. Метод Эвальда

Метод Эвальда не предполагает непосредственного вычисления потенциалов, создаваемых подрешетками положительных и отрицательных ионов, которые образуют структуру хлористого натрия. Вместо этого предполагается, что в узлах решетки Бравэ расположены единичные положительные заряды, а отрицательный заряд равномерно распределен по всему кристаллу, обеспечивая электрическую нейтральность его в целом. Проведем сначала расчет для произвольной решетки Бравэ, а затем специализируем его для конкретного случая гранецентрированной кубической решетки, в которой кристаллизуется хлористый натрий. Для этой последней цели мы возьмем суперпозицию двух решений, полученных методом Эвальда, одно из которых соответствует единичным положительным зарядам, расположенным в начале координат каждой элементарной ячейки, а другое — единичным отрицательным зарядам в точках типа $x = a/2$, $y = z = 0$. В результате такой суперпозиции однородные распределения заряда взаимно компенсируются и остаются только точечные заряды.

Прежде всего заметим, что существуют два возможных способа вычисления потенциала данной системы зарядов. Во-первых, можно просуммировать члены вида q/r , как мы уже это делали. Во-вторых, можно воспользоваться уравнением Пуассона. Последнее имеет вид

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi\rho = -\frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (9.15)$$

Здесь первое равенство записано в гауссовой системе единиц (или в атомных единицах Хартри, если расстояния выражены в атомных единицах), а второе — в системе МКС. Мы будем пользоваться первым способом записи, т. е. единицами, которые использовались в предыдущем параграфе. В уравнении (9.15) величина φ представляет собой потенциал в гауссовой системе единиц, или потенциальную энергию единичного заряда в атомных единицах Хартри. Величина ρ есть плотность заряда в гауссовых единицах, или, если пользоваться единицами Хартри, заряд в объеме a_0^3 , где a_0 — атомная единица длины. В электростатике с помощью теоремы Грина доказывается, что решение уравнения Пуассона можно записать в виде суммы членов типа q/r .

В предыдущем параграфе было показано, что решать рассматриваемую задачу путем непосредственного суммирования членов вида q/r нерационально. Здесь мы покажем, что гораздо удобнее искать решение уравнения Пуассона. Восполь-

зуемся сначала периодичностью кристалла, представляя величины φ и ρ в виде трехмерных рядов Фурье. Положим

$$\rho = \sum_{\mathbf{K}_m} P(\mathbf{K}_m) \exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}), \quad (9.16)$$

где \mathbf{K}_m — векторы обратной решетки, а P — соответствующие коэффициенты. Другими словами, напишем разложение, уже использованное в гл. 4, § 3. Ввиду периодичности кристалла такое разложение всегда возможно. Решение уравнения Пуассона в гауссовых единицах (или в атомных единицах Хартри) будет иметь вид

$$\varphi = 4\pi \sum_{\mathbf{K}_m} P(\mathbf{K}_m) \frac{\exp(\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})}{K_m^2}, \quad (9.17)$$

что легко проверить, подставляя (9.17) в уравнение Пуассона. Относительно этого решения необходимо сделать одно замечание. Из суммы (9.16) следует исключить постоянный член с $\mathbf{K}_m = 0$. В противном случае соответствующий член в (9.17) будет, очевидно, расходящимся. Согласно формуле (9.16), это означает, что средний заряд элементарной ячейки должен быть равен нулю. В реальных кристаллах это всегда выполняется: если они состоят из ионов, то каждая элементарная ячейка содержит положительные и отрицательные заряды в одинаковом количестве. Постоянная интегрирования в (9.17) выбирается так, чтобы потенциал, усредненный по элементарной ячейке, также был равен нулю. Разумеется, к правой части (9.17) можно было бы добавить и любую постоянную интегрирования, придав среднему потенциалу любое желаемое значение.

Для вычисления суммы (9.17) нужно найти фурье-компоненты плотности заряда, отвечающей точечным зарядам атомных ядер, размещенных в узлах решетки. Как известно, фурье-компоненты $P(\mathbf{K}_m)$ плотности заряда $\rho(\mathbf{r})$ определяются выражением

$$P(\mathbf{K}_m) = \Omega^{-1} \int \rho(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{v}, \quad (9.18)$$

где Ω — объем элементарной ячейки, и интегрирование ведется по этому объему. Пусть плотность заряда ρ складывается из δ -функции $\delta(\mathbf{r})$ и компенсирующего ее однородного отрицательного заряда. Интеграл от δ -функции, умноженной на экспоненту, которая равна единице при $\mathbf{r}=0$, будет равен единице; таким образом,

$$P(\mathbf{K}_m) = \Omega^{-1} \quad (9.19)$$

при $\mathbf{K}_m \neq 0$. Однородная плотность заряда при $\mathbf{K}_m \neq 0$ не дает вклада в $P(\mathbf{K}_m)$, поскольку интеграл по элементарной ячейке

от произведения постоянной величины на экспоненту $\exp(-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})$ равен нулю. При $\mathbf{K}_m = 0$ вклад однородной плотности заряда компенсируется вкладом точечного заряда, в результате чего $P(0) = 0$.

Другими словами, мы видим, что фурье-компоненты $P(\mathbf{K}_m)$ задачи Эвальда не образуют сходящейся последовательности. Сходимость ряда (9.17) могла бы быть связана лишь с множителями $|\mathbf{K}_m|^2$ в знаменателе; они, однако, никакой сходимости не дают. В самом деле, если заменить суммирование по \mathbf{K}_m интегрированием по шаровым слоям в обратном пространстве, заключенным между сферами радиусами $|\mathbf{K}|$ и $|\mathbf{K}| + |d\mathbf{K}|$, то число состояний в каждом таком слое будет пропорционально объему слоя, или $|\mathbf{K}|^2 |d\mathbf{K}|$. Входящий сюда множитель $|\mathbf{K}|^2$ сократится с множителем $1/|\mathbf{K}|^2$, в результате чего различные слои одинаковой толщины будут вносить равные вклады. Благодаря множителю $\exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})$ знак вклада с ростом $|\mathbf{K}_m|$ будет меняться, но величина его при этом уменьшаться не будет, так что не будет и сходимости.

Иначе говоря, попытка решить уравнение Пуассона при помощи разложения Фурье не улучшает положения: сходимость оказывается не лучше, чем при непосредственном суммировании кулоновских членов, пропорциональных $1/r$. Именно для устранения этой трудности Эвальд и изобрел свой знаменитый прием, о котором мы уже упоминали в гл. 4, § 3 (см. также приложение 4). Прием состоит в следующем: δ -функция, описывающая плотность точечного заряда, заменяется гауссовой функцией

$$e^3 \pi^{-3/2} \exp(-e^2 r^2), \quad (9.20)$$

где e — параметр, определяющий ширину гауссовой функции, а $e^3 \pi^{-3/2}$ — нормировочный множитель. Затем производится разложение суммы таких гауссовых функций в ряд Фурье и определяются коэффициенты $P(\mathbf{K}_m)$. Последние теперь быстро убывают с ростом $|\mathbf{K}_m|$, так что вместо расходящегося ряда, соответствующего точечным зарядам, мы будем иметь быстро сходящийся ряд. Другими словами, задача об определении потенциала, создаваемого гауссовым распределением положительных зарядов и компенсирующим их однородно распределенным отрицательным зарядом, решается легко.

Однако эта задача не соответствует реальной ситуации, так как в действительности нам нужно знать потенциал, создаваемый точечными зарядами и однородным распределением. Модифицируем поэтому наш быстро сходящийся ряд, добавляя к нему потенциал положительных точечных зарядов, находящихся в узлах решетки, и отрицательных зарядов с гауссовым

распределением. Последние компенсируют использованные ранее положительные заряды с гауссовым распределением. Такая сумма точечного положительного заряда и отрицательного заряда, распределенного по Гауссу, очень близка к распределению заряда в атоме; разумеется, на «хвосте» гауссова распределения потенциал, создаваемый атомом, близок к нулю. Следовательно, можно просто сложить потенциалы, создаваемые точечными зарядами и зарядами с гауссовым распределением. Ввиду быстрого убывания гауссовой функции ряд, получающийся при переходе ко все более удаленным узлам решетки, быстро сходится. Секрет успеха метода Эвальда заключается в возможности так выбрать значение параметра ϵ , определяющего ширину гауссовой функции, чтобы коэффициенты Фурье быстро убывали и в то же время сумма потенциалов, созданных зарядами с гауссовым распределением, имела удовлетворительную сходимость. Существует широкая область значений параметра ϵ , в которой эти условия выполняются и в которой результат не зависит от ϵ . Вне этой области сходимость того или иного ряда настолько медленна, что пользоваться им непрактично.

Обсудим теперь математические детали метода Эвальда и покажем, как можно изложить его элементарным образом. Прежде всего необходимо подставить гауссову функцию (9.20) вместо $\rho(\mathbf{r})$ в формулу (9.18). На каждую элементарную ячейку приходится одна гауссова функция, центрированная около начала координат. Ее «хвост» простирается за пределы данной ячейки, зато в нее попадают «хвосты» из других элементарных ячеек; при этом происходит точная компенсация, и правильный результат получается, если просто проинтегрировать одну гауссову функцию по всему пространству. Таким образом,

$$\begin{aligned}
 P(\mathbf{K}_m) &= \frac{1}{\Omega} \int \int \int e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} \exp[-\epsilon^2(x^2 + y^2 + z^2)] \times \\
 &\quad \times \exp[-i(K_{mx}x + K_{my}y + K_{mz}z)] dx dy dz = \\
 &= \frac{1}{\Omega} [e\pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\epsilon^2 x^2 - iK_{mx}x) dx] \times \\
 &\quad \times (\text{Аналогичные интегралы по } y \text{ и } z) = \frac{1}{\Omega} \exp\left(-\frac{|\mathbf{K}_m|^2}{4\epsilon^2}\right). \quad (9.21)
 \end{aligned}$$

Мы воспользовались здесь формулой

$$\int_0^{\infty} \exp(-\epsilon^2 x^2) \cos K_x x dx = \frac{\pi^{1/2}}{2\epsilon} \exp\left(-\frac{K_x^2}{4\epsilon^2}\right). \quad (9.22)$$

Итак, вместо (9.17) мы имеем теперь потенциал, создаваемый гауссовым распределением и однородным отрицательно заряженным фоном, т. е.

$$\varphi = \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}_m \neq 0} \frac{\exp(-\mathbf{K}_m^2/4\epsilon^2) \exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})}{|\mathbf{K}_m|^2}. \quad (9.23)$$

Другими словами, здесь появляется новый (по сравнению со случаем точечных зарядов) множитель гауссового вида $\exp(-|\mathbf{K}_m|^2/4\epsilon^2)$, обеспечивающий сходимость. При надлежащем выборе параметра ϵ существенный вклад в сумму (9.23) дают лишь несколько членов.

Теперь определим потенциал на расстоянии r от единичного точечного заряда, окруженного отрицательным зарядом, распределение которого описывается гауссовой функцией (9.20). Интегрируя непосредственно уравнение Пуассона (в сферических координатах), получаем

$$\varphi = \frac{1}{r} \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_{er}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \frac{1 - \operatorname{erf}(er)}{r}, \quad (9.24)$$

где $\operatorname{erf} x$ — функция ошибок,

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_0^x \exp(-x^2) dx. \quad (9.25)$$

Формулу (9.24) можно проверить, действуя на φ оператором Лапласа. При этом получается гауссово распределение заряда вида (9.20), умноженное на 4π , откуда следует, что потенциал (9.24) действительно создается гауссовым распределением отрицательного заряда. Далее, при стремлении r (и, следовательно, $\operatorname{erf} x$) к нулю рассматриваемая функция (9.24) переходит в $1/r$; таким образом, формула (9.24) описывает потенциал, создаваемый не только гауссовым распределением отрицательного заряда, но и единичным положительным точечным зарядом, находящимся в начале координат.

Теперь можно найти потенциал, создаваемый точечными и гауссовыми зарядами в произвольной точке пространства. Для этой цели нужно лишь сложить потенциалы (9.24), отвечающие каждому такому заряду. Ввиду быстрого убывания гауссовой функции, как уже упоминалось, при суммировании достаточно ограничиться лишь очень небольшим количеством таких слагаемых. Полный потенциал получится, если сложить результат суммирования функций вида (9.24) с потенциалом (9.23).

Следует, однако, внести еще одну поправку. Мы уже упоминали, что при интегрировании уравнения Пуассона [для вы-

вода формулы (9.17)] появляется постоянная интегрирования. В данном случае она может произвольным образом зависеть от параметра ϵ . Однако потенциал в данной точке пространства не должен зависеть от ϵ . Оказывается, что этого можно добиться, полагая постоянную интегрирования равной $-\pi/\Omega\epsilon^2$. Таким образом, имеем

$$\varphi = \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}_m \neq 0} \frac{\exp(-|\mathbf{K}_m|^2/4\epsilon^2) \exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r})}{|\mathbf{K}_m|^2} + \sum_{r_j} \frac{1 - \operatorname{erf}(\epsilon r_j)}{r_j} - \frac{\pi}{\Omega\epsilon^2}. \quad (9.26)$$

Дифференцируя этот потенциал по ϵ , можно убедиться, что он не зависит от ϵ . Дифференцирование проводится просто, и результат оказывается равным нулю. Выражение (9.26) представляет собой формулу Эвальда для потенциала, создаваемого в некоторой точке \mathbf{r} точечными зарядами и непрерывным распределением отрицательного заряда. Как уже говорилось, сумма по \mathbf{K}_m берется по всем не равным нулю векторам обратной решетки, а сумма по r_j — по всем узлам решетки, находящимся на расстоянии r_j от точки \mathbf{r} , в которой вычисляется потенциал.

Заметим, что если в формуле (9.26) устремить ϵ к бесконечности, то два последних члена обратятся в нуль, а множитель $\exp(-|\mathbf{K}_m|^2/4\epsilon^2)$ в первом члене станет равным единице. При этом формула (9.26) сводится к (9.17), где, согласно (9.19), $P(\mathbf{K}_m) = \Omega^{-1}$. Разумеется, так и должно быть, поскольку соотношение (9.17) дает совершенно точное выражение для потенциала. Так как мы показали, что функция (9.26) не зависит от ϵ , метод Эвальда просто позволяет удобным путем вычислить потенциал (9.17). В частности, как и в случае (9.17), потенциал (9.26), усредненный по всему пространству, равен нулю. Как и раньше, желая сделать его отличным от нуля, мы должны прибавить к потенциалу (9.26) некоторую постоянную.

В приложении 4 специально рассмотрен случай гранцентрированной кубической решетки (структура хлористого натрия). Там исследовано распределение потенциала в ячейке и, в частности, вычислена постоянная Маделунга, введенная в § 3. Получены также соотношения, используемые в гл. 4, § 3, для вычисления поправки Лорентца в кубических кристаллах.

§ 5. Теория решетки и колебания кристалла

В § 2 настоящей главы был приведен расчет энергии связи в ионных кристаллах по Борну и Ланде, после чего мы перешли к связанной с ним математической задаче о вычислении электростатической энергии (энергии Маделунга). При этом было

отмечено, что вид межатомных сил полностью задан. Соответственно теорией Борна и Ланде можно воспользоваться для изучения колебаний решетки, т. е. для вычисления частотного спектра, о котором шла речь в гл. 7 и 8. Первоначально эта задача рассматривалась в работах [11–13]. В дальнейшем был дан подробный расчет для хлористого натрия.

При выборе вида межатомных сил Келлерман [12, 13] использовал методы Борна и Ланде, а при рассмотрении колебаний решетки — метод Борна—Кармана. Прежде всего он поставил вопрос о том, какова энергия кристалла со смещенными атомами или, что то же самое, какие силы действуют на атомы, испытывавшие малые смещения. Эти силы обусловлены двумя причинами. Во-первых, возникают короткодействующие силы отталкивания, пропорциональные либо $1/r^n$ (по Борну и Ланде), либо $\exp(-ar)$ (по Борну и Майеру). В любом случае явный вид силы отталкивания используется лишь при вычислении двух постоянных — значений силы и ее производной по r в положении равновесия. Вводя эти две постоянные, можно избежать необходимости явно задавать вид короткодействующих сил. Указанные постоянные можно определить, зная период решетки и сжимаемость (см. § 2). Во-вторых, между смещенными ионами должны действовать силы кулоновского происхождения. Они были вычислены с помощью некоторого обобщения метода Эвальда.

Сделав эти предположения (а также пренебрегая для простоты силами отталкивания между всеми ионами, кроме ближайших соседей), Келлерман смог вычислить коэффициенты, обозначенные в гл. 7, § 2, через $C_{ab}(s, t, R_j - R_i)$. Поступая, как указано в гл. 7, § 2, он нашел значения частот, отвечающих различным ветвям колебаний для произвольного волнового вектора. Было вычислено 280 значений частоты колебаний, соответствующих 48 различным точкам зоны Бриллюэна. С помощью условий симметрии это позволило определить 6700 частот в зоне Бриллюэна. Единственное, что предпринял Келлерман для проверки правильности своих расчетов, было вычисление теплоемкости решетки по найденному колебательному спектру. В результате получилось хорошее согласие с опытом, но, как мы уже упоминали, теплоемкость не очень чувствительна к виду колебательного спектра (на что указывает сравнительно большой успех теории Дебая).

Однако к тому времени, когда Келлерман проводил свои расчеты, уже было показано [11], что простая модель такого типа не согласуется с известными диэлектрическими свойствами кристалла. Келлерман пренебрегал электронной поляризуемостью ионов, и поэтому, как следует из формулы (8.11), он не мог

получить правильного отношения частот продольных и поперечных оптических колебаний при больших длинах волн, ω_L и ω_T . Это показано на фиг. 8.2, которая взята из работы [14], посвященной исследованию иодистого натрия. Штриховыми линиями на этой фигуре изображены результаты расчетов, выполненных для иодистого натрия по методу Келлермана. Видно, что последний приводит к большой ошибке при вычислении величины ω_L . Вместе с тем он дает неплохие значения для частоты остаточных лучей ω_T .

Первый очевидный шаг на пути к улучшению результатов работ [12, 13] состоит в учете не только решеточной, но и электронной поляризуемости, как сделано в гл. 8, § 4. Это, однако, еще не дает хорошего совпадения с найденным экспериментально колебательным спектром решетки. Сигети [15, 16] провел расчет, аналогичный изложенному в гл. 8, § 4, но, конечно, с тем отличием, что для щелочногалоидных кристаллов использовалась обычная поправка Лорентца (т. е. постоянная b , введенная в гл. 8, § 4, считалась равной единице). В результате получилась формула, эквивалентная (8.20) при $b=1$,

$$\kappa_e = \kappa_\infty + \frac{(\kappa_\infty + 2)^2 (Ne^2/9m\epsilon_0)}{\omega_0^2 - (\kappa_\infty + 2)(Ne^2/9m\epsilon_0) - \omega^2}. \quad (9.27)$$

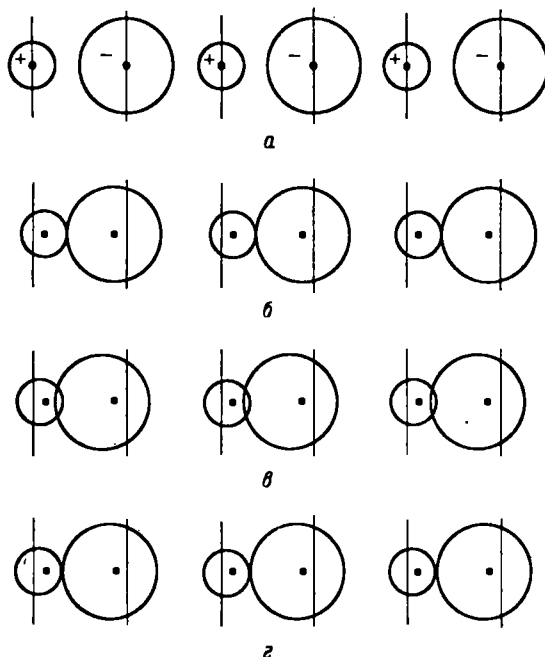
Значения входящих сюда величин κ_∞ , N , e и приведенной массы m известны из опыта, так что можно найти резонансную частоту ω_T

$$\omega_T^2 = \omega_0^2 - (\kappa_\infty + 2) \frac{Ne^2}{9m\epsilon_0}; \quad (9.28)$$

при этом величина ω_0 предполагается известной. Фактически ее можно выразить, согласно теории Борна—Ланде, через экспериментальные значения постоянной решетки и сжимаемости. Полученное таким путем значение ω_T не совсем хорошо согласуется с опытом. Сигети пришел к выводу, что необходимо модифицировать эту величину, заменяя заряд электрона e эффективным зарядом, меньшим истинного. Тогда стало ясно, что требуется дальнейшее усовершенствование теории. На необходимость этого указывалось уже в работе [11], где был намечен и один из возможных путей развития: была высказана идея о зависимости короткодействующих сил отталкивания между ионами от электронной поляризации последних. Эта идея была развита в 50-х годах в работах [17–21]; в дальнейшем она широко использовалась Кохрэном и сотр. (см. обзоры [22–24])¹⁾.

¹⁾ См. также статьи [1578–1591, 1593, 1654–1658, 1661, 4864–4867] в библиографии в конце книги.

Суть дела можно пояснить с помощью фиг. 9.2. На фиг. 9.2, *a* показан ряд положительных и отрицательных ионов в неполяризованном щелочногалоидном кристалле; мы взяли здесь случай малых положительных и больших отрицательных ионов.



Фиг. 9.2. Оболочечная модель.

Большие окружности изображают электронные оболочки отрицательных ионов, малые — оболочки положительных ионов. Точками обозначены ядра и внутренние оболочки. *a* — ионы в несмещенных положениях; *b* — электрическое поле, направленное слева направо, смещает ионы как целое, без деформации; *c* — смещение оболочек влево под действием поля вызывает эффект электронной поляризации (положения ядер те же, что и в случае *b*); *d* — оболочки соседних ионов отталкиваются одна от другой, частично компенсируя эффект электронной поляризации.

Примером может служить иодистый натрий, использованный ранее в качестве иллюстрации в связи с фиг. 8.2. На фиг. 9.2, *b* показан результат смещения ионов при поперечных оптических колебаниях в отсутствие электронной поляризации. Предполагается, что напряженность электрического поля направлена вдоль оси *x*, так что положительные ионы смещаются в этом направлении, а отрицательные ионы — в противоположном.

Однако, помимо этого эффекта, будет иметь место и электронная поляризация. Весьма грубо ее можно описать, считая,

что отрицательно заряженная оболочка смещается в направлении отрицательных значений x , а ядро остается несмещенным. Поскольку поляризуемость отрицательного иона значительно больше поляризуемости положительного, на фиг. 9.2, в внешняя электронная оболочка отрицательного иона сильно смещена влево при очень слабом смещении оболочек положительных ионов.

Как видно из фиг. 9.2, в, мы имеем близко расположенные пары положительного и отрицательного ионов. Из принципов молекулярной теории следует [4], что при этом электронные оболочки должны деформироваться; этот факт не был учтен в простых теориях ионной и электронной поляризации. Очевидно, имеет место частичное перекрытие заполненных оболочек соседних положительного и отрицательного ионов. При этом, как видно уже на примере иона H_2^+ (см. [4]), заряд будет переходить из области перекрытия ионов к противоположным сторонам этих ионов. Такое перераспределение заряда частично ответственно за отталкивание ионов. Мы сделали попытку схематически показать этот эффект на фиг. 9.2, г, немного сдвинув вправо электронные оболочки отрицательных ионов и влево — оболочки положительных ионов. Это соответствует локальному отталкиванию оболочек. Последний эффект приводит к результирующей поляризации (особенно отрицательных ионов), вектор которой направлен противоположно вектору поляризации, создаваемой смещением ионов, и вектору электронной поляризации. Это сказывается как на диэлектрической проницаемости, так и на силах взаимодействия между ионами.

Указанный эффект (и особенно его влияние на диэлектрическую проницаемость) был приближенно рассмотрен в работах [19–21]. Дик и Оверхаузер [20] сделали попытку вычислить долю смещения оболочек за счет перекрытия путем сравнения с расчетом отталкивания между двумя атомами гелия по Гайтлеру и Лондону (см. [4])¹⁾. В других цитированных статьях этот эффект рассматривался эмпирически, с помощью феноменологических параметров. Предложенная там (и обобщенная затем Кохрэном, который интересовался главным образом динамикой решетки) постановка задачи заключается в следующем.

Содержимое элементарной ячейки (один положительный и один отрицательный ион) описывается с помощью не двух, а четырех переменных: смещений ядер (или ионных остовов)

¹⁾ Однако эти авторы не учитывали необходимости варьирования волновых функций для минимизации энергии и его влияния на теорему вириала и соотношение между кинетической и потенциальной энергиями. В результате они пришли к ошибочным заключениям относительно изменения потенциала и кинетической энергии в процессе перекрытия.

двух ионов и смещений их внешних оболочек. Последние не обязательно должны совпадать со смещениями ионных остовов. Предполагается, что между соседними ионами действуют силы четырех типов: взаимодействие остовов двух ионов, взаимодействие ионных остовов с их же внешними оболочками, взаимодействие остова одного иона с внешней оболочкой другого и, наконец, взаимодействие между внешними оболочками двух ионов. Силы второго типа (между остовом и оболочкой одного и того же иона) ответственны за электронную поляризуемость. Гипотеза Дика и Оверхаузера состоит в том, что значительная часть короткодействующего отталкивания между соседними ионами обусловлена взаимодействием между внешними оболочками двух ионов; тем самым учитывается эффект взаимного расталкивания оболочек (см. фиг. 9.2, *г*). В рамках высказанных предположений были составлены классические уравнения движения для каждой из систем — для каждого ионного остова и каждой оболочки в элементарной ячейке. Таким путем можно было построить теорию колебаний решетки по образцу гл. 7, считая лишь, что элементарная ячейка содержит четыре частицы. При этом, однако, предполагалось, что эффективные массы электронных оболочек пренебрежимо малы по сравнению с массами ядер, т. е. резонансные частоты их бесконечно велики (подобно электронным резонансным частотам при рассмотрении инфракрасных колебаний). При расчете использовались эмпирически подобранные значения различных силовых констант.

Этот способ, в частности, применял Кохрэн, который подбирал эмпирические константы так, чтобы получить наилучшее совпадение с экспериментально найденными колебательными спектрами решетки и с другими опытными данными. Именно таким путем были вычислены спектры, изображенные сплошными линиями на фиг. 8.2. В этом частном случае были сделаны еще некоторые упрощения: рассматривалась только электронная поляризуемость отрицательных ионов, поскольку электронная поляризуемость иона натрия гораздо меньше, чем у иона иода. Далее, учитывалось только отталкивание между ближайшими соседними ионами. В дальнейшем были проделаны более сложные расчеты без указанных аппроксимаций. При этом получились формулы с большим числом подгоночных параметров, что позволило добиться практически полного совпадения с экспериментом. Однако в расчетах такого типа в значительной степени утрачивается физический смысл различных произвольных постоянных, и вопрос о том, как далеко здесь имеет смысл заходить, остается открытым. В любом случае константы можно найти, подгоняя колебательные спектры для специальных симметричных направлений в зоне Бриллюэна.

Если затем провести расчет для несимметричных направлений, то результат оказывается в очень хорошем согласии с опытом, так что мы имеем здесь во всяком случае ценный и полезный метод интерполяции.

Эта «оболочечная модель» была обобщена во многих различных направлениях. Отметим прежде всего по существу эквивалентный метод, развитый Машкевичем и Толпыго¹⁾ с несколько более теоретической точки зрения. Названные авторы записали энергию кристалла в виде функции, квадратичной как по смещениям ядер различных ионов, так и по электронной поляризации ионов. Оболочечную модель Кохрэна также можно выразить в этих терминах, но тогда не получается прежней ясной картины рассматриваемых физических процессов. Далее, ряд приложений данной модели (включая и некоторые работы Кохрэна с сотрудниками и Машкевича и Толпыго) был посвящен неонным кристаллам с более чем одним атомом в элементарной ячейке. В частности, речь шла о кремнии и германии. Из фиг. 9.2 ясно, что эффект расталкивания внешних оболочек будет иметь место как для ионов, так и для атомов; в любом случае он будет вызывать добавочную поляризацию атомов, не описываемую через обычные поляризуемости во внешнем макроскопическом поле. На основе этой модели были построены вполне удовлетворительные теории колебаний решетки в кристаллах указанного типа. На фиг. 8.3 представлены теоретические кривые для колебательного спектра германия; видно их хорошее согласие с экспериментом. Попутно отметим одну особенность этого спектра, о которой мы пока не упоминали: предельные значения частот поперечной и продольной оптических ветвей при $k = 0$ совпадают друг с другом в отличие от случая щелочногалогидных кристаллов. Причину такого совпадения легко усмотреть из формулы (8.11). В спектре неонных кристаллов нет оптически активного резонанса в инфракрасной области, поскольку колебания соответствующей частоты связаны с движением не ионов, а нейтральных атомов, не взаимодействующих со световыми волнами. Поэтому величины ω_0 и ω_∞ в формуле (8.11), а следовательно, и частоты ω_L и ω_T оказываются одинаковыми.

Другую область применения оболочечной модели представляет теория сегнетоэлектричества, развитая Кохрэном^[23, 24]. Кохрэн обобщил изложенные выше рассуждения на случай кристаллов типа титаната бария, у которого в элементарной ячейке имеется более двух атомов. При этом удалось получить разумную интерпретацию сегнетоэлектрических свойств таких

¹⁾ См. работы [3501—3507] в библиографии в конце книги.

кристаллов, не вводя предположения о большом значении поправки Лорентца (см. гл. 8, § 4 и 5). Эффекты поляризации, обусловленные взаимодействием оболочек, по-видимому, способствуют появлению бесконечно большой диэлектрической проницаемости, которая почти достигается в рассматриваемых веществах при температуре фазового перехода. Заметим, однако, что, поскольку в таких кристаллах не выполняются допущения, оправдывающие обычный подход Лорентца, автору настоящей книги кажется, что этот более сложный случай нуждается в дополнительном исследовании.

Все описанные здесь методы следуют полуэмпирическому подходу, предложенному в 1918 г. Борном и Ланде. Как уже упоминалось в этой главе, при таком подходе существование короткодействующих сил отталкивания рассматривается как эмпирический факт; разумеется, в те времена было невозможно объяснить его на основе более глубокой теории. В настоящее время мы знаем, как можно понять его с помощью квантовой механики. В следующем параграфе мы обратимся к обобщению методов Борна — Ланде на случай квантовомеханического расчета энергии ионных кристаллов. Будет показано, что, пока рассматривается статическая задача, квантовая механика весьма успешно объясняет природу энергии связи этих веществ. С другой стороны, аналогичные исследования колебаний решетки и явлений, полуэмпирически описываемых оболочечной моделью, еще только начинаются ^{[25] 1)}. В настоящее время существуют методы, позволяющие теоретически исследовать кристаллы, в которых положительные и отрицательные ионы совершают относительно друг друга движения типа поперечных оптических колебаний. Щелочногалогидные кристаллы в таком деформированном состоянии обладают тетрагональной симметрией. Определив полную энергию как функцию смещений атомов и используя затем квадратичное приближение для энергии (или применяя теорему Гельмана — Фейнмана), мы могли бы рассчитать форму энергетических зон при различных деформациях. Это позволило бы вычислить квазиупругую постоянную для поперечных оптических колебаний. Можно надеяться, что в ближайшем будущем такие расчеты будут выполнены, и это поставит теорию колебаний решетки на более прочный фундамент.

§ 6. Квантовомеханические расчеты для ионных кристаллов

Мы уже упоминали о существовании квантовомеханических расчетов энергии связи в ионных кристаллах. Обсудим теперь

¹⁾ См. также работы [3364, 3366—3368] в библиографии в конце книги.

как их можно было бы выполнить. Как было указано в § 1, с помощью методов квантовой механики можно вычислить энергию как функцию параметра a ; есть надежда, что при этом получатся результаты, хорошо согласующиеся с эмпирическим уравнением Борна и Ланде (9.1) или с соответствующей формулой для случая экспоненциальных сил отталкивания. Такой расчет был впервые проведен Ландшоффом [26, 27], а впоследствии гораздо более подробно Лёвдином [28–30]. Мы опишем ход вычислений Лёвдина, которые относятся к числу наиболее полных для ионных кристаллов. Они выполнены для всего ряда щелочногалоидных кристаллов со структурой как хлористого натрия, так и хлористого цезия.

В основе вычислений Лёвдина лежало допущение о полнотой ионной структуре. По предположению такой структурой обладает, например, хлористый натрий NaCl , состоящий из ионов Na^+ и Cl^- ; волновые функции последних можно определить методом самосогласованного поля для соответствующих свободных ионов. Таким образом, задача становится аналогичной квантовомеханическому расчету энергии отталкивания двух атомов гелия [4]. Как указано в книге [4], результат решения задачи о взаимодействии заполненных оболочек атомов или ионов не зависит от того, пользуемся ли мы методом Гайтлера — Лондона или методом молекулярных орбит. В книге [4] случай двух атомов гелия был рассмотрен с помощью обоих этих методов, и результаты оказались одинаковыми. Этим фактом Лёвдин и воспользовался. Именно ему принадлежит (применительно к ионным кристаллам) развитие метода Гайтлера — Лондона с неортогональными орбитами (общую формулировку этого метода можно найти в приложении 9 к книге [4]).

Для задачи о взаимодействии атомов или ионов с заполненными оболочками характерно то, что удовлетворительные результаты дает уже волновая функция, взятая в виде одного детерминанта. При этом конфигурационное взаимодействие оказывается гораздо менее существенным, чем в аналогичной задаче о молекуле H_2 , где имеет место ковалентная связь. Напомним, что результат вычисления такого детерминанта не меняется при линейном преобразовании орбит. По этой причине методы Гайтлера — Лондона и молекулярных орбит и приводят в данном случае к одному и тому же результату. В методе Гайтлера — Лондона в качестве базисных функций используются атомные орбиты, локализованные на различных атомах. Так, в случае NaCl на ионах натрия локализованы орбиты $1s$, $2s$, $2p$, а на ионах хлора — $1s$, $2s$, $2p$, $3s$ и $3p$. С другой стороны, в методе молекулярных орбит вместо атомных волновых функций берутся их блоховские суммы, отвечающие заполненным энергетическим

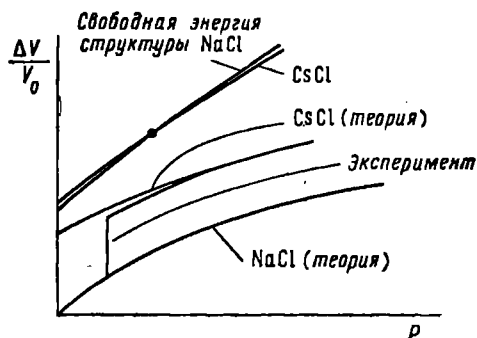
зонам. По указанной выше причине детерминанты в обоих случаях одинаковы, хотя и выглядят по-разному. Можно было бы построить детерминант и иным путем — из ортонормированных атомных функций типа функций Ванье. Именно этот метод был использован Лёвдином. Применяя ортонормированные функции, он получил возможность работать с детерминантом, построенным из ортогональных орбит. Как известно (см. [4], приложение 9), формулы для энергии и другие величины в этом случае значительно проще, чем при использовании неортогональных базисных функций.

Различные интегралы, которые необходимо вычислить, чтобы найти энергию, уже рассматривались нами при определении энергии, соответствующей детерминанту из одночастичных волновых функций. В теории молекул встречаются различные виды интегралов: одно-, двух-, трех- и четырехцентровые. Лёвдин вычислял интегралы с помощью метода, по существу аналогичного методу Барнетта и Коулсона (см. [4]), хотя его работа была опубликована раньше. Имея дело с замкнутыми оболочками, он получил возможность ввести ряд упрощений. Так, во многих случаях результаты удалось упростить, комбинируя интегралы, соответствующие различным значениям магнитного квантового числа m . Некоторые интегралы имеют кулоновский вид; сюда относятся, в частности, выражения, описывающие взаимодействие каждого из атомных ядер с полным распределением заряда всех других ионов кристалла. Эти члены имеют тот же вид, что и рассмотренные в предыдущих параграфах в связи с задачей Маделунга и с методом ее решения, предложенным Эвальдом. Этот метод нашел применение в расчетах Лёвдина. Анализ их показывает, что здесь, как и в классической теории Борна и Ланде, основную роль играет электростатическое взаимодействие между ионами. Поэтому не удивительно, что окончательный результат напоминает результаты Борна и Ланде и так же согласуется с экспериментом.

В сущности Лёвдин обнаружил далеко идущее сходство между квантовомеханическим расчетом и теорией Борна — Ланде. Мы не будем вдаваться здесь в подробности его вычислений. Как уже упоминалось, они не содержат ничего нового по сравнению с тем, что делалось ранее в теории молекул и в теории Маделунга. Сосредоточим свое внимание на результатах. Как уже отмечалось, здесь в широких пределах наблюдается согласие с экспериментом — качественное, а в весьма значительной мере и количественное.

В качестве примера приведем фиг. 9.3, взятую из статьи Лёвдина [30]. Видно замечательное согласие расчета с экспериментальными данными. На этом графике представлены резуль-

таты относительно изменения объема КСl с давлением. Вместо того чтобы просто вычислить сжимаемость и ее изменение с давлением, Лёвдин нашел зависимость относительного уменьшения объема от давления, охватив примерно ту область, в которой сейчас уже возможны опыты при высоких давлениях. На фиг. 9.3 представлены две кривые зависимости объема от давления: одна для структуры NaCl, другая — для структуры



Фиг. 9.3. Нижние кривые представляют зависимость относительного сжатия $\Delta V/V_0$ от давления для КСl [30].

Приведены теоретические кривые для структур NaCl и CsCl. На экспериментальных кривых обнаруживается полиморфное превращение — резкий переход от структуры NaCl при низких давлениях к структуре CsCl при высоких давлениях. Верхние кривые изображают теоретическую зависимость свободной энергии обеих фаз от объема. Устойчивому состоянию отвечает меньшая свободная энергия. В точке перехода две кривые должны пересекаться.

CsCl. Экспериментально было обнаружено, что при низких давлениях КСl имеет структуру хлористого натрия, а при высоких — принимает структуру хлористого цезия. Последней соответствует меньший объем. Поэтому экспериментальная кривая зависимости изменения объема от давления в точке, где происходит полиморфный переход, претерпевает разрыв. Как видно из фиг. 9.3, это приводит к внезапному скачку экспериментальной кривой из положения, в котором она хорошо согласуется с расчетной кривой для структуры NaCl, в положение, где она совпадает с расчетной кривой для структуры CsCl. Совпадение теоретических и экспериментальных кривых в каждой из этих областей, как показал Лёвдин, типично для щелочногалогидных кристаллов, в ряде которых наблюдаются такие переходы. Если вспомнить, что при расчете не использовалось никаких эмпирических параметров, то мы поймем, как далеко ушла теория от полумпирического подхода Борна — Ланде.

Зададимся вопросом: почему при определенном давлении происходит переход от одной кристаллической структуры к другой? Здесь нам придется столкнуться с термодинамической теорией фазовых переходов [31]¹⁾. Условие равновесия фаз состоит в том, что их свободные энергии должны быть одинаковы. Устойчивой является фаза с меньшей свободной энергией. Чтобы определить точку фазового перехода, нужно вычислить зависимость свободной энергии каждой фазы от давления и найти точку пересечения этих двух кривых. Это и было сделано Лёвдином; соответствующие кривые показаны на фиг. 9.3. Видно, что они действительно пересекаются и притом недалеко от того давления, при котором фактически происходит переход; кривая для структуры NaCl лежит ниже при низких давлениях, а для структуры CsCl — при высоких давлениях. Другими словами, теория в состоянии объяснить фазовый переход и свойства каждой отдельной фазы. Из фиг. 9.3 видно, что достаточно лишь очень небольшого изменения энергии одной из фаз относительно другой, чтобы точка пересечения кривых свободной энергии совпала с экспериментальным ее положением.

Лёвдин рассмотрел не только однородное сжатие кристалла, как на фиг. 9.3, но и другие виды деформации, например сдвиг. Он определил изменения энергии, вызываемые этими деформациями, и таким путем нашел упругие постоянные. В этой связи он исследовал еще один вопрос, привлечший к себе большое внимание. Можно показать, что в общем случае кубический кристалл характеризуется тремя независимыми упругими постоянными, c_{11} , c_{12} и c_{44} . Мы не станем здесь углубляться в теорию упругости для точного определения этих постоянных, а отошлем читателя к статье Лёвдина или к цитированной в ней литературе. Существенно лишь одно давно известное свойство: в кристалле с межатомными силами типа Борна — Ланде, т. е. ларными силами притяжения или отталкивания, зависящими только от расстояния между двумя данными атомами, имеет место равенство $c_{12} = c_{44}$. Некоторое время назад было экспериментально обнаружено, что для щелочногалоидных кристаллов это соотношение не выполняется. Лёвдин показал, что в квантовой теории соотношение $c_{12} = c_{44}$ не обязательно выполняется, и явно вычислил все три указанные упругие постоянные. Результат оказался в довольно хорошем согласии с экспериментом. Таким образом, квантовомеханическая модель позволяет не только вычислять сжимаемости, но и рассматривать проблему упругости в целом.

¹⁾ См. также [35]. — Прим ред.

Лёвдин произвел расчет энергии связи щелочногалогидных кристаллов, т. е. полной энергии кристалла, в котором ионы находятся в положениях равновесия, за вычетом энергии отдельных ионов. Для этого он вычислил обе указанные величины в отдельности. В некоторых случаях (LiCl , NaCl и KCl) полученные результаты удалось сравнить с экспериментом; при этом было получено совпадение вычисленных и наблюдаемых величин с точностью до 1—2%. Это очень хорошее совпадение, но следует помнить, что, как уже отмечалось, основную часть энергии связи в данном случае составляет электростатическая энергия; поэтому вычисленная таким путем энергия связи оказывается гораздо больше разности между энергией равновесной конфигурации и энергией состояния, в котором атомы (а не ионы) отстоят далеко друг от друга.

Итак, следует признать, что расчеты Лёвдина удивительно хорошо согласуются с экспериментом. Тем не менее нужно иметь в виду, что в ряде пунктов их можно улучшить. Прежде всего в них были использованы волновые функции изолированных ионов без учета модификации, претерпеваемой ими при образовании кристалла. Из недавних расчетов в теории молекул известно, что такая модификация довольно существенна и ее следует принимать во внимание при точном расчете. Ввиду гораздо меньшего перекрытия атомных орбит в ионных кристаллах она играет там гораздо меньшую роль, чем в кристаллах с ковалентной связью; тем не менее при описании атомных орбит следовало бы ввести некоторые параметры, определяя их вариационным методом для всех межатомных расстояний. Такой подход был бы самосогласованным.

Далее, мы знаем, что для достижения хорошего согласия с опытом необходимо учитывать конфигурационное взаимодействие. Как уже упоминалось, в ионных кристаллах оно играет меньшую роль, чем в ковалентных, но учитываться оно все же должно. Чисто ионная модель, описываемая одним детерминантом Лёвдина, преувеличивает ионную природу кристалла. При рассмотрении молекулы LiH в книге [4] мы считали, что в этом случае для правильного описания молекулы нужно использовать базисные функции не только ионного, но и ковалентного типа. В случае LiH ковалентный характер, несомненно, выражен гораздо отчетливее, чем в случае щелочногалогидных кристаллов. Можно полагать все же, что линейная комбинация детерминантных функций дает лучшее описание щелочногалогидного кристалла, чем один только детерминант Лёвдина. В частности, если конфигурационное взаимодействие имеет достаточно сложный вид, то энергия как функция параметра a меняется от энергии основного состояния при равновесном

значении a до суммы энергий отдельных нейтральных атомов (а не ионов) при бесконечном значении a . Возможно, однако, что при значениях a , гораздо больших равновесного, происходит довольно резкий переход от волновой функции ярко выраженного ионного типа, характерной для малых расстояний, к волновой функции атомного типа на больших расстояниях. В этом состоит отличие данной задачи от случая LiH, где имеет место постепенное изменение во всей рассмотренной области меж-атомных расстояний.

Несмотря на эти замечания, расчеты Лёвдина составляют важный этап в развитии теории энергии связи кристаллов. До настоящего времени очень мало ионных кристаллов было исследовано столь же подробно. Лундквист^[32] рассмотрел примерно так же детально случай LiH и пошел несколько дальше Лёвдина, исследовав влияние изменения атомных орбит атома водорода. Ямасита^[33] приблизительно с той же точностью вычислил энергию решетки LiF. Хауленд^[34], изучая структуру энергетических зон кристалла KCl, произвел для этого кристалла расчет, аналогичный сделанному Лёвдином. Зоненшайн¹⁾ вычислил энергию связи MnO методом, не менее точным, чем у Лёвдина, и получил вполне удовлетворительные результаты. Де Чикко¹⁾ получил столь же хорошие результаты, не пользуясь при расчете энергии связи KCl методом ЛКАО, как другие авторы, а используя волновые функции типа присоединенных плоских волн и рассматривая обменное взаимодействие в приближении свободных электронов.

Кроме этих сравнительно немногочисленных точных расчетов, имеется много работ, в которых более сложные ионные кристаллы исследуются с помощью методов, близких к подходу Борна и Ланде. Для различных кристаллических структур была вычислена энергия Маделунга, о которой мы говорили выше. Поскольку в ионных кристаллах главную роль в энергии связи играет электростатическое взаимодействие, можно с хорошей точностью вычислить энергию связи даже для сложных структур. В частности, в некоторых случаях разность энергий между различными полиморфными модификациями одного и того же кристалла определяется в основном разностью энергий Маделунга; вычисляя последнее, часто удается сделать выводы относительно устойчивости различных полиморфных модификаций одного и того же вещества. Мы не будем здесь вдаваться в подробности этих расчетов; если же читатель заинтересуется ими, то ссылки на некоторые из относящихся сюда работ можно найти в литературе к гл. 10, § 4.

¹⁾ Расчеты не опубликованы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Madelung E., Phys. Zs., **19**, 524 (1918).
2. Born M., Landé A., Sitzber. Preuss. Akad. Wiss., 1048 (1918).
3. Born M., Landé A., Verhandl. Deut. Phys. Ges., **20**, 202, 210 (1918).
4. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 1, Electronic Structure of Molecules, New York, 1963. (См. перевод: Дж. Слэтер, Электронная структура молекул, изд-во «Мир», 1965.)
5. Slater J. C., Phys. Rev., **23**, 488 (1924).
6. Born M., Mayer J. E., Zs. Phys., **75**, 1 (1932).
7. Evjen H. M., Phys. Rev., **39**, 675 (1932).
8. Sakamoto Y., Journ. Chem. Phys., **28**, 164 (1958).
9. Emersleben O., Zs. Phys., **24**, 73, 97 (1923).
10. Ewald P. P., Ann. d. Phys., **64**, 253 (1921).
11. Lyddane R. H., Herzfeld K. F., Phys. Rev., **54**, 846 (1938).
12. Kellermann E. W., Phil. Trans. Roy. Soc., **A238**, 513 (1940).
13. Kellermann E. W., Proc. Roy. Soc., **A178**, 17 (1941).
14. Woods A. D. B., Cochran W., Brockhouse B. N., Phys. Rev., **119**, 980 (1960).
15. Szigeti B., Trans. Faraday Soc., **45**, 155 (1949).
16. Szigeti B., Proc. Roy. Soc., **A204**, 51 (1950).
17. Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, **7**, 284 (1952).
18. Yamashita J., Progr. Theor. Phys., **8**, 280 (1952); **12**, 454 (1954).
19. Yamashita J., Kurosawa T., Journ. Phys. Soc. Japan., **10**, 610 (1955).
20. Dick B. G., Jr., Overhauser A. W., Phys. Rev., **112**, 90 (1958).
21. Hanlon J. E., Lawson A. W., Phys. Rev., **133**, 472 (1959).
22. Cochran W., Rep. Progr. Phys., **26**, 1 (1963).
23. Cochran W., Adv. Phys., **9**, 387 (1960).
24. Cochran W., Adv. Phys., **10**, 401 (1961).
25. Lundqvist S. O., Lundström V., Tenerz E., Waller I., Arkiv Fys., **15**, 193 (1959).
26. Landshoff R., Zs. Phys., **102**, 201 (1936).
27. Landshoff R., Phys. Rev., **52**, 246 (1937).
28. Löwdin P. O., Arkiv Mat. Astron. Fis., **A35(9)** (1947).
29. Löwdin P. O., Arkiv Mat. Astron. Fis., **A35(30)** (1948).
30. Löwdin P. O., Adv. Phys., **5**, 1 (1956).
31. Slater J. C., Introduction to Chemical Physics, New York, 1939.
32. Lundqvist S. O., Arkiv Fys., **8**, 177 (1954).
33. Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, **7**, 284 (1952).
34. Howland L. P., Phys. Rev., **109**, 1927 (1958).
- 35*. Киржниц Д. А., Полевые методы теории многих частиц, М., 1963.
- 36*. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, 2-е изд., изд-во «Наука», 1964.

МЕТОДЫ ТОМАСА — ФЕРМИ И ВИГНЕРА — ЗЕЙТЦА И ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ В МЕТАЛЛАХ

§ 1. Метод Томаса — Ферми и его применение к теории твёрдого тела

В предыдущей главе было показано, каким образом Борн, Ланде и Маделунг сумели построить очень плодотворную теорию энергии связи и упругих постоянных ионных кристаллов. Начало их исследований относится к 1918 г., т. е. к периоду до создания квантовой механики. Для металлов ничего подобного сделать не удалось. Основным источником энергии связи в ионных кристаллах является кулоновское притяжение между ионами, полностью описываемое классической теорией. В случае металлов такое классическое описание связи невозможно. Известно [1], что ковалентная связь (например, в молекуле водорода) обусловлена перекрытием волновых функций атомных электронов, т. е. представляет собой квантовомеханический эффект. В металлах имеет место связь того же рода, и потому до появления квантовой механики в 1926 г. не было даже описательного или качественного объяснения металлической связи.

Начиная с 1926 г. появился ряд теорий различной степени сложности, которые привели к должному пониманию природы металлической связи. Они будут рассмотрены в настоящей главе. Мы уже упоминали, что первой теорией металлов, появившейся после 1926 г., была теория свободных электронов Зоммерфельда и его сотрудников, основанная на статистике Ферми. Эта теория учитывала взаимодействия электронов с атомными ядрами, исходя лишь из представления об электронном газе в присутствии равномерно распределенного положительного заряда (так что в целом кристалл электрически нейтрален). В рамках такой модели нет никакого механизма связи. С другой стороны, в модели Томаса — Ферми [2, 3]¹⁾, предложенной в 1927—1928 гг., статистика Ферми — Дирака применяется к электронам в потенциальном поле, которое может иметь различный вид. При этом накладывается условие самосогласования; однако вместо решения уравнения Шредингера используется

¹⁾ Применение этой модели к атомным структурам кратко обсуждается в книге [1]. Указанный метод рассматривается также в книге Гомбаша [4] и во многих статьях в библиографии в конце книги, ссылки на которую даны в конце этой главы.

классическая механика и представление о газе свободных электронов. Первоначально метод Томаса — Ферми был использован в теории атома, но в дальнейшем он оказался полезным и для изучения твердых тел, как ионных кристаллов, так и металлов. В настоящем параграфе мы рассмотрим этот простейший подход к задаче, а в дальнейшем перейдем к более сложной и точной трактовке проблемы сил сцепления в металлах, требующей уже решения уравнения Шредингера.

Начнем изложение идеи метода Томаса — Ферми с рассмотрения формулы (1.12). Согласно последней, число электронов, приходящихся на единицу объема газа свободных электронов, в случае статистики Ферми — Дирака равно

$$\frac{N}{v} = \frac{8}{3} \pi (2mE_F)^{3/2} \frac{1}{h^3}. \quad (10.1)$$

Если заряд электрона равен $-e$, то плотность заряда будет

$$\rho = -e \frac{8}{3} \pi (2mE_F)^{3/2} \frac{1}{h^3}. \quad (10.2)$$

Пусть мы имеем потенциал $V(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} — радиус-вектор. За начало отсчета энергии примем энергию Ферми. Тогда в каждой точке наименьшая возможная энергия электрона равна потенциальной энергии $-eV$; добавляя к ней произвольную кинетическую энергию, можно получить сколь угодно большое значение полной энергии. Гипотеза Томаса и Ферми состояла в том, что в данной точке пространства электронный газ ведет себя как газ свободных электронов, и его максимальная возможная кинетическая энергия соответствует обращению полной энергии в нуль (начало отсчета энергии по-прежнему совмещено с уровнем Ферми). При выводе формулы (1.12) предполагалось, конечно, что потенциальная энергия равна нулю, и E_F есть максимальная кинетическая энергия электрона. В рассматриваемом случае следует считать, что максимальная кинетическая энергия в сумме с потенциальной энергией ($-eV$) составляет энергию Ферми (равную нулю), так что максимальная кинетическая энергия равна eV . Другими словами, мы предполагаем, что плотность заряда связана с потенциалом соотношением, вытекающим из (10.2):

$$\rho = -e \frac{8}{3} \pi (2meV)^{3/2} \frac{1}{h^3}. \quad (10.3)$$

Эта величина есть плотность заряда электронов; кроме нее, имеется еще заряд ядер.

Наложим теперь условие самосогласования: электростатический потенциал V должен определяться из уравнения Пуассона, в которое входят плотность заряда электронов ρ , определяемая

соотношением (10.3), и плотность заряда ядер. В системе единиц МКС, где

$$\nabla^2 V = - \frac{4\pi\rho}{4\pi\epsilon_0},$$

имеем

$$\nabla^2 V = \frac{4\pi e}{4\pi\epsilon_0} \frac{8}{3} \pi (2meV)^{3/2} \frac{1}{h^3}. \quad (10.4)$$

Это уравнение справедливо всюду, кроме точек, в которых находятся ядра; последним отвечают сингулярности потенциала V . В гауссовой системе единиц множителя $4\pi\epsilon_0$ в знаменателе не будет. Соотношение (10.4) представляет собой дифференциальное уравнение для потенциала, основанное на предположении о самосогласованном характере поля и на допущении, что распределение Ферми (строго говоря, применимое только в случае газа свободных электронов) справедливо в каждой точке пространства и при наличии потенциального поля, зависящего от координат. Задача состоит в решении уравнения (10.4) с граничными условиями, зависящими от характера рассматриваемой задачи. В случае изолированного атома потенциал V сферически симметричен; при достаточно малых значениях r он сводится к потенциалу атомного ядра, а на бесконечности стремится к нулю. Этот случай рассматривается, например, в книге [1].

Одно из первых приложений метода Томаса — Ферми к теории твердого тела принадлежит Ленцу и Иенсену [5, 7]; дальнейшие исследования на эту тему отражены в статьях [8–14]. В работе [5] были выдвинуты некоторые исходные идеи, примененные в [6, 7] к случаю ионного кристалла со структурой хлористого натрия. Поскольку статистический метод лучше всего должен подходить для атома со многими электронами, в первой своей работе Иенсен рассмотрел кристалл RbVg, однако в последующих работах он изучал и другие щелочногалоидные кристаллы. Ленц показал, что уравнение Томаса — Ферми можно вывести из вариационного принципа, а Иенсен представил функции, описывающие плотности положительных и отрицательных ионов, в виде, удобном для применений. Мы изложим этот вариационный метод в следующем параграфе. Далее Иенсен рассмотрел задачу о взаимодействии ионов в кристалле, используя, разумеется, результаты работы Маделунга относительно потенциала ионной решетки (см. предыдущую главу).

Исследуя полную энергию кристалла, Иенсен нашел ее зависимость от межатомного расстояния. При этом он сначала считал ионы жесткими, с неизменной плотностью заряда, а за-

тем учел их взаимную поляризацию. В этом приближении вычисление полной энергии не представляет труда. Плотность заряда для данного элемента объема можно определить из соотношения (10.3), а потенциал — решая уравнение (10.4). Затем можно найти потенциальную энергию заряда, заключенного в этом элементе объема, и потенциальную энергию ядра в поле электронов и других ядер. Что касается кинетической энергии, то предполагается, что в данной точке пространства она такая же, как и в ферми-газе с той же максимальной кинетической энергией. Легко показать, что при абсолютном нуле температуры средняя кинетическая энергия электронов ферми-газа составляет $\frac{3}{5}$ энергии Ферми (мы положили сейчас потенциальную энергию равной нулю, что позволило легко найти их кинетическую энергию). В работах [6, 7] было показано, что полная энергия имеет минимум при расстоянии между ядрами, близком к наблюдаемому в реальном кристалле.

Упомянутые выше авторы исследовали не только полную энергию, но и кинетическую и потенциальную энергии в отдельности (их, конечно, нетрудно было вычислить). Известно [15–17], что в приближении Томаса — Ферми кинетическая и потенциальная энергии удовлетворяют теореме вириала. В приложении 6 мы покажем, что для твердого тела, находящегося под гидростатическим давлением, теорема вириала принимает вид

$$\text{Кинетическая энергия} = -\frac{1}{2} (\text{Потенциальная энергия}) + \frac{3}{2} p v, \quad (10.5)$$

где p — давление, v — объем. Это соотношение имеет тот же вид, что и в теории молекул [1]. Как и в последнем случае, при бесконечно большом межатомном расстоянии, а также при его равновесном значении, когда давление равно нулю, кинетическая энергия равна потенциальной, умноженной на $-\frac{1}{2}$. Поэтому уменьшение полной энергии при построении кристалла из атомов или ионов складывается из уменьшения потенциальной энергии и увеличения кинетической. (Первое вдвое больше уменьшения полной энергии, а второе по величине равно последнему.) Общий характер зависимости кинетической и потенциальной энергий от объема — такой же, как и в двухатомной молекуле (см. [1], гл. 2, § 5). В случае ионного кристалла при сближении атомов, первоначально бесконечно удаленных друг от друга, кинетическая энергия непрерывно возрастает, а потенциальная — непрерывно убывает, так что полная энергия в равновесном состоянии достигает минимума. При сжатии кристалла до объема, меньшего равновесного, сила отталкивания увеличивается, поскольку кинетическая энергия возрастает

быстрее, чем убывает потенциальная. Эти особенности были обнаружены Иенсенем и затем рассмотрены Гельманом [16].

Следуя работам [5-7], автор настоящей книги и Краттер [18, 19] применили тот же метод к металлам, пользуясь при этом методом ячеек. Они заменили ячейку Вигнера — Зейтца для шелочного металла сферой равного объема, как это сделали Вигнер и Зейтц в задаче о натрии. При этом уравнение Томаса — Ферми (10.4) становится сферически симметричным, как и для изолированного атома, но граничные условия будут иными. В обоих случаях при малых значениях r потенциал сводится к кулоновскому потенциалу ядра. Различие, однако, возникает при больших r . Нас не интересует решение при бесконечных r . Однако на поверхности сферы Вигнера — Зейтца производная dV/dr должна обращаться в нуль. Эта производная есть не что иное, как напряженность электрического поля, и если сфера электрически нейтральна (а это должно быть так), то на поверхности не должно быть поля. В работах [18, 19] было численно найдено семейство кривых $V(r)$, удовлетворяющих уравнению (10.4) и имеющих нулевой наклон при различных значениях радиуса r . Таким образом были получены решения для различных сфер Вигнера — Зейтца или же для разных объемов металла.

При вычислении полной энергии как функции объема металла никакого минимума не получилось. При уменьшении объема энергия непрерывно возрастает; при этом приращение кинетической энергии оказывается большим, чем требуется для компенсации убывания потенциальной энергии. Впоследствии этот факт был аналитически доказан Фейнбергом [20]. Притяжение, полученное Иенсенем для ионных кристаллов, обусловлено взаимодействием между противоположно заряженными ионами, которое отсутствует в случае металлов. Поэтому для удержания металла в равновесном состоянии требуется внешнее давление. Его можно рассчитать, исходя из соотношения $p = -dE/dv$, где через v обозначен объем. За время, прошедшее после опубликования цитированных выше работ, был выполнен ряд аналогичных, но более трудоемких расчетов с целью найти уравнение состояния металлов при очень высоких давлениях.

Описанные выше расчеты обладают одним очень серьезным недостатком: они не учитывают обменной и корреляционной энергий. В них предполагается, что на электрон действует поле, создаваемое ядрами и всеми электронами, включая и его самого. Следующий шаг по пути улучшения метода (сделанный некоторыми из авторов цитированных работ) состоит во введении поправки, описывающей обменное взаимодействие. Мы обсудим его в следующем параграфе.

§ 2. Обменная поправка в методе Томаса — Ферми

Проблема обменного взаимодействия свободных электронов обсуждалась рядом авторов [21–24] еще на заре развития квантовой механики. Здесь мы лишь вкратце опишем ситуацию¹⁾. Дирак [22] исследовал обменное взаимодействие с точки зрения метода Томаса — Ферми. Блох [21] рассматривал задачу о газе свободных электронов в отсутствие внешнего поля, но, интересуясь магнитными свойствами такого газа, он вынужден был учесть обменное взаимодействие. Более поздние статьи Вигнера и Зейтца [23] и Бриллюэна [24] содержали приложения работ Дирака и Блоха к практическим случаям.

Дирак и Блох исходили из детерминантного представления полной волновой функции, выбирая в качестве элементов детерминанта одноэлектронные функции, зависящие от координат и спинов. Явный вид их был взят таким же, как и в случае свободных электронов, т. е. координатная зависимость описывалась плоскими волнами $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$. При этом предполагалось, что волновые векторы \mathbf{k} заполняют сферу, ограниченную поверхностью Ферми (см. гл. 1, § 4). Тогда вычисление обменной поправки к полной энергии оказалось возможным. Существуют два способа ее вычисления, из которых один принадлежит Дираку, а второй — Блоху. Для вычисления поправочного члена в методе Томаса — Ферми более удобной представляется процедура, предложенная Дираком.

Дирак вычислял обменный член в уравнении, эквивалентном уравнению Хартри — Фока. В системе МКС это уравнение имеет вид

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 u_i(1) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_a \frac{Z_a}{r_{1a}} u_i(1) + \\
 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\sum_j \int u_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} u_j(2) dv_2 \right] u_i(1) - \\
 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \left[\int u_j^*(2) \frac{1}{r_{12}} u_i(2) dv_2 u_j(1) \right] = E_i u_i(1). \quad (10.6)
 \end{aligned}$$

Оно совпадает с уравнением (5.1) в книге [1] с той лишь разницей, что там использовались атомные единицы. Величины $u_i(1)$ здесь представляют собой одноэлектронные волновые функции, зависящие от пространственных и спиновых координат. Первые два члена представляют результат применения к этой функции

¹⁾ Подробное изложение вопроса на сравнительно элементарном уровне можно найти в книге [60]. — *Прим. ред.*

операторов кинетической энергии электронов и потенциальной энергии их в поле ядер (Z_a есть заряд ядра в единицах заряда электрона, r_{1a} — расстояние первого электрона от a -го ядра). Затем в уравнении (10.6) следует выражение для энергии кулоновского взаимодействия между i -м электроном и всеми остальными, включая его самого (поскольку суммирование по j включает случай $j=i$). Последний член в левой части (10.6) выражает обменное взаимодействие.

В случае свободных электронов, когда функции u_i и u_j имеют вид плоских волн, обменный член в уравнении (10.6) можно вычислить явно. Его удастся записать в виде произведения функции $u_i(1)$ на обменную потенциальную энергию, причем последняя определяется соотношением

Обменная потенциальная энергия =

$$= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 4 \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{1/3} F(\eta). \quad (10.7)$$

Здесь, как и раньше, N/v есть число электронов в единице объема, а величина η определяется выражением

$$\eta = \frac{|\mathbf{k}|}{k_{\max}}, \quad (10.8)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор, принадлежащий волновой функции u_i в уравнении (10.6), а k_{\max} — значение величины $|\mathbf{k}|$ на уровне Ферми. Последнее можно найти из соотношения (1.12), полагая

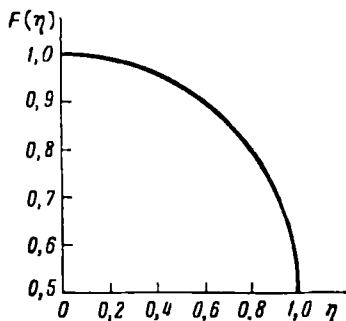
$$E_F = \frac{k_{\max}^2}{2m} \hbar^2, \quad (10.9)$$

где m — масса электрона; формула (10.9) дает кинетическую энергию свободного электрона. Наконец, функция $F(\eta)$ имеет вид

$$F(\eta) = \frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln \frac{1+\eta}{1-\eta}; \quad (10.10)$$

ее график показан на фиг. 10.1. Отметим, что $F(\eta)$ принимает значения от единицы при $\eta = 0$ (что отвечает нулевой кинетической энергии электрона) до $1/2$ при $\eta = 1$ (что соответствует поверхности Ферми).

Мы видим, таким образом, что обменная энергия зависит от волнового вектора (т. е. от энергии) рассматриваемого элек-



Фиг. 10.1. Функция $F(\eta)$ [см. (10.10)], описывающая зависимость относительной обменной энергии газа свободных электронов от параметра η (отношения импульса электрона к фермиевскому импульсу).

величины $|\mathbf{k}|$ на уровне Ферми. Последнее можно найти из соотношения (1.12), полагая

трона. Чтобы включить обменное взаимодействие в схему метода Томаса — Ферми (получив то, что принято называть методом Томаса — Ферми — Дирака или сокращенно ТФД), мы поступим следующим образом. Как и при формулировке метода Томаса — Ферми, примем энергию Ферми за нуль; потенциальная энергия в поле всех электронов будет равна $-eV$. Однако в действительности к значению потенциальной энергии электрона на поверхности Ферми следует добавить обменную поправку. Последнюю, как мы только что видели, можно найти, полагая $F(\eta) = 1/2$. Таким образом, имеем

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{2/3} - eV - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 2 \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{1/3} = 0. \quad (10.11)$$

Мы получили квадратное уравнение относительно величины $[(3/8\pi)(N/v)]^{1/3}$. Его решение имеет вид

$$\left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{1/3} = \frac{1}{\hbar} \left[\pm \sqrt{2meV + \frac{4m^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}} + \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right], \quad (10.12)$$

причем мы должны выбрать знак плюс. Найденное отсюда значение N/v нужно подставить в уравнение Пуассона

$$\nabla^2 V = \frac{4\pi e}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{v}. \quad (10.13)$$

Таким образом, окончательно получаем следующее уравнение Томаса — Ферми — Дирака:

$$\nabla^2 V = \frac{4\pi e}{4\pi\epsilon_0} \frac{8\pi}{3\hbar^3} \left[\sqrt{2meV + \frac{4m^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}} + \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right]^3. \quad (10.14)$$

Если опустить здесь слагаемое $2me^2/(4\pi\epsilon_0)\hbar$ и его квадрат, то уравнение (10.14) сведется к уравнению Томаса — Ферми (10.4). Уравнение (10.14) было использовано, например, в упомянутых выше расчетах Слэтера и Краттера [18].

Рассмотрим теперь выражение для полной энергии и покажем, что уравнение (10.14) можно получить из него с помощью вариационного метода; это впервые было сделано в работах [5, 10]. Представим энергию в виде интеграла по объему от энергии, приходящейся на один электрон, умноженной на объемную плотность электронов N/v . Как уже упоминалось, средняя кинетическая энергия, приходящаяся на один электрон, составляет $3/5$ энергии Ферми E_F ; формула (1.12) дает энергию Ферми как функцию от N/v . Потенциальная энергия электронов в поле ядер равна

$$- \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \sum_a \frac{Z_a}{r_{1a}} \frac{N(1)}{v} dv_1, \quad (10.15)$$

где $N(1)/v$ — плотность электронов в точке 1, в которой вычисляется потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядрами. Потенциальная энергия взаимодействия между электронами составляет

$$\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \int \frac{N(1)}{v} \frac{N(2)}{v} \frac{1}{r_{12}} dv_1 dv_2, \quad (10.16)$$

где множитель $1/2$ введен для того, чтобы не считать одну и ту же пару электронов дважды.

Для вычисления энергии обменного взаимодействия нужно прежде всего усреднить выражение (10.7) по распределению Ферми. Это соответствует среднему значению функции $F(\eta)$, равному $3/4$. Обменную поправку нужно вычесть из входящего в (10.16) члена

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{N(2)}{v} \frac{1}{r_{12}} dv_2,$$

который представляет собой потенциальную энергию всех электронов (включая и рассматриваемый) в точке 1. Поэтому при вычислении обменной потенциальной энергии необходимо ввести тот же множитель $1/2$, что и в (10.16). Таким образом, для обменной потенциальной энергии в результате получаем

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2} \int \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v}\right)^{1/3} \frac{N}{v} dv = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/3} \int \left(\frac{N}{v}\right)^{4/3} dv. \quad (10.17)$$

Полная энергия равна

$$\begin{aligned} & \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3} \int \left(\frac{N}{v}\right)^{5/3} dv - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \sum_a \frac{Z_a}{r_{1a}} \frac{N(1)}{v} dv_1 + \\ & + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \int \frac{N(1)}{v} \frac{N(2)}{v} \frac{1}{r_{12}} dv_1 dv_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/3} \int \left(\frac{N}{v}\right)^{4/3} dv + \\ & + \sum_{\text{Пары } a, b} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_a Z_b}{r_{ab}}. \end{aligned} \quad (10.18)$$

Это выражение для энергии и было использовано в цитированных выше работах [5-7, 10, 18]. Первое слагаемое здесь описывает кинетическую энергию, второе — энергию взаимодействия электронов с ядрами, третье — кулоновское взаимодействие между электронами (включая взаимодействие каждого электрона с самим собой), четвертое — обменную поправку. Последний член дает энергию взаимодействия между ядрами. Ниже мы обсудим результат вычисления энергии рассматриваемым методом, а пока, следуя Ленцу и Йенсену, покажем, что уравнение Томаса — Ферми — Дирака можно получить из выражения (10.18), варьируя плотность электронов N/v . Для этой цели вычислим

вариацию энергии при изменении N . Поскольку полное число электронов должно оставаться неизменным, воспользуемся методом неопределенных множителей, полагая равной нулю сумму вариации энергии и произведения величины $\int (N/v) dv$ на постоянный множитель.

Небольшого внимания здесь требует только один пункт: в слагаемом, описывающем кулоновское взаимодействие электронов, следует варьировать как $N(1)$, так и $N(2)$; при этом получаются два одинаковых члена и множитель 2 в знаменателе сокращается. В результате имеем

$$\int \delta \left(\frac{N(1)}{v} \right) \left[\frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{3/2} \frac{5}{3} \left(\frac{N(1)}{v} \right)^{5/2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_a \frac{Z_a}{r_{1a}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{N(2)}{v} \frac{1}{r_{12}} dv_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{3/2} \frac{4}{3} \left(\frac{N(1)}{v} \right)^{3/2} - \text{const} \right] dv_1 = 0. \quad (10.19)$$

Как обычно в таких задачах, положим множитель при $\delta(N/v)$ под знаком интеграла равным нулю. Входящая в него константа есть просто аддитивная постоянная в выражении для энергии, и ее можно выбрать произвольно; в дальнейшем мы будем считать ее равной нулю. Таким образом, получаем

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{3/2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_a \frac{Z_a}{r_{1a}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{N(2)}{v} \frac{1}{r_{12}} dv_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 2 \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{3/2} = 0. \quad (10.20)$$

Определим кулоновский потенциал V , входящий в уравнение (10.11), выражением

$$V(1) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \sum_a \frac{Z_a}{r_{1a}} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{N(2)}{v} \frac{1}{r_{12}} dv_2 \quad (10.21)$$

(это обычный электростатический потенциал, создаваемый ядрами и всеми электронами). Тогда становится очевидным, что уравнения (10.20) и (10.11) идентичны; с другой стороны, последнее и было использовано при выводе уравнения Томаса — Ферми — Дирака (10.14). Итак, уравнение ТФД действительно получается из обычного вариационного принципа: та плотность заряда (или потенциал), которая обеспечивает минимум полной энергии (10.18) (включая и обменную энергию), удовлетворяет уравнению ТФД.

С этим результатом связан один важный факт, который мы сейчас обсудим и который иногда упускают из виду. Уравнение

(10.20) эквивалентно одноэлектронному уравнению Шредингера, например (10.6). В (10.20) можно выделить член, соответствующий кинетической энергии (он записан в виде, типичном скорее для модели свободных электронов, чем в строгом согласии с квантовой механикой), два члена, описывающие кулоновское взаимодействие (первый — взаимодействие электронов с ядрами, второй — взаимодействие электронов друг с другом), и, наконец, обменный член. Однако последний в уравнении (10.20) выглядит не так, как на первый взгляд следовало бы ожидать. Согласно формуле (10.7), обменная потенциальная энергия, соответствующая последнему члену в уравнении (10.6), должна бы составлять

$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} 4 \left(\frac{3}{8\pi} \frac{N}{v} \right)^{1/3} F(\eta), \quad (10.22)$$

где, как уже упоминалось, среднее значение величины $F(\eta)$ равно $3/4$. Это, казалось бы, должно привести нас к выводу, что в обменный член должен входить численный множитель 3, а не 2, как в уравнении (10.20). В действительности дело заключается в том, что обменный потенциал, входящий в уравнение ТФД, относится не к электрону со средней энергией, а к электрону на поверхности Ферми. Для последнего величина $F(\eta)$ равна $1/2$, что составляет $2/3$ от среднего значения $3/4$. Именно поэтому обменный член и составляет лишь $2/3$ от того значения, которого следовало бы ожидать на первый взгляд.

Выражение для обменной потенциальной энергии (10.22) (с $F(\eta) = 3/4$) рекомендовалось автором настоящей книги [25]¹⁾ для подстановки в уравнения Хартри — Фока (10.6) вместо точного обменного потенциала; при этом величина N/v рассматривалась как локальная плотность электронов. Этот усредненный обменный потенциал с успехом применялся при решении ряда задач, относящихся как к атомам, так и к твердым телам. Представляется разумным определять волновые функции и одноэлектронные энергии, пользуясь именно этим средним значением $F(\eta)$. Можно думать, что при этом получится лучшее приближение для одноэлектронных энергий, чем если положить $F(\eta) = 1/2$ (как в уравнении ТФД). Значение $1/2$ относится не к средним величинам, а к поверхности Ферми. Некоторые авторы [26, 27] считают, что ввиду важной роли вариационного принципа лучше, как в случае уравнения ТФД, пользоваться упрощенной обменной поправкой, определяемой путем вариации полной энергии, чем использовать усредненный потенциал с $F(\eta) = 3/4$. Автор настоящей книги не согласен с такой точкой зрения и считает, что для

¹⁾ Ссылки на работы по теории атома, выполненные этим методом, даны в гл. 11, § 3.

расчета энергетических зон более важны одноэлектронные энергии. Благодаря вариационному принципу небольшое отличие в волновых функциях, которое получается при использовании значения $F(\eta) = 3/4$ (а не $1/2$), приводит лишь к поправкам второго порядка для полной энергии. Успех вычисления¹⁾ полной энергии для КС1 методом присоединенных плоских волн с $F(\eta) = 3/4$ показывает, что при таком подходе можно с хорошим приближением получить как полную энергию, так и одноэлектронные энергии.

Прежде чем закончить этот параграф, обсудим еще зависимость энергии металлов от межатомного расстояния, найденную Слэтером и Краттером методом ТФД. При определении энергии из уравнения (10.20), а величины N/v — из уравнения ТФД (10.14) оказалось, что учет обменного члена приводит к значительному уменьшению эффекта отталкивания, вытекающего из уравнения Томаса — Ферми без обменного члена; однако притяжения при этом все же не возникает. Поэтому рассматриваемый метод представляется неспособным объяснить равновесную конфигурацию металла. Это не должно нас особенно удивлять. В книге [1] была рассмотрена зависимость энергии молекул от межатомного расстояния. Там показано, что расчет методом самосогласованного поля с использованием волновой функции детерминантного вида иногда указывает на наличие связанных состояний, а иногда не дает их. В некоторых случаях вся или почти вся энергия обусловлена корреляционными эффектами, которые в молекулах связаны с конфигурационным взаимодействием. Изложенный здесь метод ТФД дает весьма грубое приближение даже по сравнению с методом самосогласованного поля, не учитывающим корреляции между электронами с антипараллельными спинами. Поэтому не следует ожидать от него слишком хороших результатов. Более трудоемкие расчеты энергии связи металлов основаны на учете корреляционных эффектов. В следующем параграфе мы рассмотрим первый из расчетов такого рода, проведенный Вигнером и Зейтцем для натрия.

§ 3. Вычисление обменной и корреляционной энергии методом Вигнера — Зейтца

В своей известной работе о структуре кристалла натрия Вигнер и Зейтц показали, что волновые функции электронов проводимости в натрии во всем пространстве, за исключением непосредственной окрестности внутренних оболочек атомов натрия,

¹⁾ De C i s s o, не опубликовано.

очень похожи на волновую функцию свободного электрона. Поэтому представлялось вполне разумным рассматривать в данном случае обменные и корреляционные эффекты так, как если бы мы имели дело с газом свободных электронов. Указанные авторы, в частности, интересовались определением зависимости полной энергии кристалла от постоянной решетки, что необходимо для вычисления энергии связи, сжимаемости и т. д. Такого рода расчеты разной степени сложности описаны в работах [28–31] (см. также книгу [32]).

Напомним, что Вигнер и Зейтц заменяли атомный полиэдр равновеликой сферой радиусом r_s . Задача состояла в вычислении зависимости энергии электрона в атоме, зажатом внутри этой сферы, от r_s . В результате получилась кривая с минимумом при некотором значении межатомного расстояния. Предполагалось, что энергии электронов ионного остова (в случае натрия это $1s$ -, $2s$ - и $2p$ -электроны) в кристалле такие же, как и в изолированном атоме, и потому их можно не рассматривать. Тогда для определения зависимости полной энергии кристалла от r_s оказалось необходимым найти одноэлектронную энергию E_0 как функцию от r_s , умножить ее на число атомов и затем ввести ряд поправок.

Прежде всего рассматриваемая волновая функция, периодически продолжаемая в соседние элементарные ячейки, относится ко дну распределения Ферми. Поэтому нужно добавить поправочный член, соответствующий средней кинетической энергии (КЭ) электрона. Согласно формуле (10.18),

$$\text{Средняя КЭ} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{N}{v} \right)^{1/3}. \quad (10.23)$$

Чтобы выразить эту энергию через r_s , используем тот факт, что число электронов внутри сферы радиусом r_s равно единице, т. е.

$$\frac{4}{3} \pi r_s^3 \frac{N}{v} = 1, \quad \frac{N}{v} = \frac{3}{4\pi r_s^3}, \quad (10.24)$$

откуда

$$\text{Средняя КЭ} = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{2/3} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s^2} = \frac{9\hbar^2}{80\pi m} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s^2}. \quad (10.25)$$

Если выразить радиус r_s в атомных радиусах a_0 , а энергию — в ридбергах, то получим

$$\text{Средняя КЭ} = \frac{9\pi}{10} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{(r_s/a_0)^2} \text{ ридберг} = \frac{2,21}{(r_s/a_0)^2} \text{ ридберг}. \quad (10.26)$$

Умножая эту среднюю кинетическую энергию, приходящуюся на один электрон, на число электронов в единице объема N/v , получаем среднюю кинетическую энергию единицы объема, которую нужно добавить к $(N/v)E_0$.

По предположению величина E_0 включает полную энергию (сумму кинетической и потенциальной энергий) электрона проводимости в сфере Вигнера — Зейтца. Однако она не содержит никаких поправок на взаимодействие между различными электронами проводимости в кристалле. Рассматривая принятое приближение буквально, мы должны были бы считать, что каждый атом заключен в сферу с непроницаемыми стенками. Тогда все сферы содержали бы по одному электрону проводимости, и взаимодействие между ними было бы невозможно. В реальном кристалле, однако, таких стенок нет, и все электроны могут свободно передвигаться по кристаллу, а потому и взаимодействовать друг с другом. Как уже отмечалось, волновые функции электронов проводимости оказались близкими к плоским волнам. Поэтому казалось разумным рассматривать взаимодействие электронов так, как если бы они образовывали газ свободных частиц, а не двигались в поле положительных ионов Na^+ , расположенных в узлах объемноцентрированной кубической решетки. Чтобы кристалл был электрически нейтральным, электронный газ с плотностью, соответствующей одному электрону на объем $\frac{4}{3}\pi r_s^3$, должен быть нейтрализован распределенным положительным зарядом. Рассматривая взаимодействие электронов, Вигнер и Зейтц предположили, что этот положительный заряд равномерно распределен по всему объему. Таким образом, дело свелось к задаче о газе свободных электронов, в котором распределения положительного и отрицательного зарядов точно компенсируются. При этом напряженность электрического поля всюду равна нулю, а уравнения Хартри — Фока имеют точное решение в виде плоской волны. Это решение является самосогласованным в том смысле, что плоские волны описывают пространственно однородное распределение заряда, соответственно чему полная плотность заряда всюду равна нулю.

В рассматриваемом случае можно вычислять обменную энергию в приближении свободных электронов. Соответственно было сделано предположение, что каждому электрону отвечает дырка в фермиевском фоне. Полная обменная потенциальная энергия определяется как произведение числа электронов в единице объема на среднюю обменную энергию. Согласно (10.17),

$$\begin{aligned}
 \text{Средняя обменная энергия} &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{N}{v}\right)^{1/2} = \\
 &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{3}{2} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{r_s} = \\
 &= -\frac{3^{3/2}}{2^{3/2}\pi^{2/2}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_s}. \quad (10.27)
 \end{aligned}$$

Выражая r_s через a_0 , а энергию в ридбергах, получаем

$$\begin{aligned} \text{Средняя обменная энергия} &= -\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s/a_0} \text{ ридберг} = \\ &= -\frac{0,916}{r_s/a_0} \text{ ридберг}. \end{aligned} \quad (10.28)$$

Выражения (10.26) и (10.28) были получены в работе Вигнера [31].

В простейшем варианте расчета энергии кристалла натрия Вигнер и Зейтц вычислили энергию E_0 , затем ввели поправку на энергию Ферми (10.26) и обменную энергию (10.28) и таким путем определили энергию на один электрон как функцию r_s . Оказалось, что она имеет минимум, но далеко не столь глубокий, чтобы можно было объяснить экспериментальное значение энергии связи кристалла. Соответственно был сделан вывод о необходимости ввести дополнительную поправку на корреляцию между электронами с антипараллельными спинами. Как известно¹⁾, волновая функция атома гелия убывает при сближении двух электронов с противоположно направленными спинами, причем методом Хартри — Фока этот эффект не улавливается. Приняв во внимание указанную корреляцию, мы получим еще меньшее значение энергии. Вигнер получил следующее выражение:

$$\text{Корреляционная энергия} = -\frac{0,58}{(r_s/a_0) + 5,1} \text{ ридберг}. \quad (10.29)$$

Как было показано многими авторами, оно дает хорошее приближение для корреляционной энергии, которую следует добавить к обменной.

Ход рассуждений Вигнера, приведших его к формуле (10.29), можно качественно представить следующим образом. Будем исходить из невозмущенных волновых функций в виде плоских волн, а затем воспользуемся теорией возмущений, чтобы учесть отталкивание между электронами. В результате получится выражение, в которое формула (10.29) переходит при большой электронной плотности (т. е. при малых значениях r_s). С другой стороны, по мнению Вигнера, при малой плотности электронов, т. е. при больших r_s , газ свободных электронов на фоне равномерно распределенного положительного заряда должен конденсироваться, образуя сгустки в точках объемноцентрированной кубической решетки. Энергию отрицательно заряженных сгустков, «замороженных» в равномерно распределенном положительном заряде, можно найти методом Маделунга. При этом получается предельное выражение $-0,58/(r_s/a_0)$ ридберг, в ко-

¹⁾ См., например, [6]. — *Прим. ред.*

торое и переходит формула (10.29) при больших r_s . Формула (10.29) представляет собой интерполяцию между двумя указанными предельными случаями. Детальный ход рассуждений Вигнера, однако, очень сложен, и проследить за ними в его статье непросто.

Используя эту корреляционную поправку, а также обменную поправку и формулу для энергии Ферми, можно найти зависимость полной энергии от r_s (или от межатомного расстояния), которая ведет себя нужным образом и дает хорошее количественное согласие с наблюдаемыми значениями энергии связи. На формуле (10.29) для корреляционной энергии основано большое количество работ. Тем не менее следует отметить, что при реалистическом подходе к задаче о корреляции электронов в металлическом натрии эта формула не дает качественно правильного описания.

В настоящее время стало общепринятым, следуя Лёвдину, определять корреляционную энергию как разность между энергией, вычисленной в приближении Хартри — Фока, и экспериментальным значением энергии. При этом расчет в приближении Хартри — Фока включает и вычисление релятивистских поправок, так как последние могут оказаться столь большими, что их нужно учитывать при детальном сравнении теории с экспериментом. Кристалл натрия в некотором отношении сходен с молекулой водорода. Именно возьмем детерминантную волновую функцию, составленную из одноэлектронных функций блоховского типа, зависящих от пространственных и спиновых координат и отвечающих определенным значениям вектора \mathbf{k} . Если вычислить среднюю энергию системы в состоянии, описываемом этой функцией, то мы не получим правильного предельного перехода к случаю атомов, бесконечно удаленных друг от друга. Вместо этого, как и в случае молекулы H_2 , получится слишком большая энергия, отвечающая волновой функции, которая описывает смесь «ионизованного» и «нейтрального» состояний двух атомов. При учете правильного выражения для корреляционной энергии этот ошибочный результат метода Хартри — Фока должен быть исправлен. Иначе говоря, корреляционная поправка должна оставаться конечной при бесконечном межатомном расстоянии (т. е. при сколь угодно большом значении r_s). Функция Вигнера (10.29), напротив, стремится к нулю при $r_s \rightarrow \infty$. Поэтому формула (10.29) даже приблизительно не описывает правильного вида корреляционной энергии в кристалле натрия.

Неоправданное предположение, которое ввел Вигнер, состоит в замене истинного распределения положительного заряда при больших r_s равномерно распределенной его плотностью (или в замене электронного облака газом свободных электронов). Это,

разумеется, то же самое допущение, которое было сделано и при вычислении обменной поправки; последняя также не ведет себя должным образом в предельном случае больших межатомных расстояний. В следующей главе мы рассмотрим другие, более сложные методы трактовки корреляции в электронном газе щелочных металлов. Они, однако, также используют указанное выше неоправданное допущение и, следовательно, дают результаты, столь же далекие от истины.

Авторы работ, посвященных энергии связи щелочных металлов¹⁾, в большинстве своем применяли эти непоследовательные методы вычисления корреляционной и обменной энергии. Тем не менее они объявляли о согласии с опытом, далеко превосходящем по точности большую часть расчетов двухатомных молекул как функции межатомного расстояния. Исключение составляют лишь очень немногие случаи (например, молекула H_2), для которых были проведены очень точные вычисления. Автор настоящей книги считает, что эти на первый взгляд точные расчеты энергии связи щелочных металлов фактически не столь обоснованны, как принято думать. Это, по-видимому, один из тех случаев, когда не вполне правильная теория дает численные результаты, точность которых превышает точность самих исходных постулатов и потому не стимулирует дальнейшего критического пересмотра последних²⁾. Много таких случаев знает ранняя, менее удовлетворительная теория молекул. В следующем параграфе мы изложим более современный подход к задаче об энергии связи щелочных металлов, не использующий указанных плохих приближений при вычислении обменной и корреляционной энергии.

§ 4. Метод расчета энергии связи в щелочных металлах по Лёвдину и метод альтернантных молекулярных орбит

Лучший из существующих методов вычисления энергии связи щелочных металлов был предложен Лёвдином [33]. Последний усовершенствовал метод ЛКАО настолько, что он стал способен давать точные результаты, а затем применил его к кристаллу

1) Соответствующая библиография указана в конце главы.

2) Последовательный расчет методами современной теории многих тел показывает, что выражения (10.26) и (10.28) — это первые члены ряда теории возмущений, представляющего собой нечто вроде разложения по степеням r_s . Дальнейшие члены ряда, описывающие корреляционную энергию, содержат не только степени, но и логарифмы r_s , так что о последовательном разложении энергии связи в ряд Зейлора по степеням r_s говорить нельзя; тем не менее все это представление (для вырожденного газа) справедливо лишь при $r_s < 1$. — *Прим. ред.*

натрия и получил для энергии связи результаты, весьма хорошо согласующиеся с опытом. Этот расчет выполнен в сущности по образцу метода Хартри — Фока: используется детерминантная функция, элементы которой представляют собой блоховские суммы атомных орбит, описывающие все одноэлектронные состояния под поверхностью Ферми. С помощью этого детерминанта вычисляется энергия кристалла и сравнивается с энергией отдельных атомов, полученной тем же путем. Основное направление здесь совпадает с тем, которое было развито в более ранних работах Лёвдина по щелочногалоидным кристаллам [34–36]. Как и в этих работах, здесь учитывается неортогональность атомных функций, трех- и четырехцентровые интегралы и т. д. Однако детали расчетов удалось упростить с помощью нескольких изящных приемов.

Очевидно, этот расчет представляет собой некоторую разновидность метода молекулярных орбит. Соответственно корреляция не учитывается в нем должным образом. В действительности при больших межатомных расстояниях в основном состоянии щелочного металла все атомы электрически нейтральны — на каждом из них связано по одному электрону. Амплитуда смешанного состояния, отвечающего положительным и отрицательным ионам и описываемого детерминантной волновой функцией Хартри — Фока, при увеличении межатомного расстояния должна обращаться в нуль точно так же, как обращается в нуль амплитуда ионного состояния в случае молекулы H_2 при увеличении расстояния между ядрами атомов. Иначе говоря, волновая функция должна быть такой, чтобы наличие электрона у одного какого-нибудь атома приводило к отталкиванию всех других электронов с любой ориентацией спина. Однако числа электронов с обеими ориентациями спина в кристалле одинаковы. Следовательно, если на данном атоме локализован электрон с данной ориентацией спина, то на соседних атомах с большей вероятностью будут находиться электроны с противоположным спином.

Такое распределение много лет назад рассматривалось автором настоящей книги [37] применительно к той же задаче. Работа [37] сыграла свою роль в разработке метода альтернантных молекулярных орбит, который в дальнейшем был предложен Лёвдином и др. [38–52] для вычисления корреляционной энергии в линейных цепочках атомов и в кристаллах типа натрия. Этот метод позволяет найти волновые функции, обладающие требуемыми свойствами и описывающие концентрацию электронов с противоположными спинами на соседних атомах, но не на одном и том же. В настоящее время уже появилось несколько работ, в которых таким методом вычислялась энергия связи линейных

цепочек и кристаллов металлического водорода [53, 54]; этот метод был применен (тем же автором) также к задаче об энергии связи кристалла лития. В настоящее время это, вероятно, наиболее многообещающий подход; в отличие от метода Вигнера — Зейтца здесь получается правильная зависимость энергии связи от межатомного расстояния.

Указанный метод был изложен нами в книге [1] применительно к молекуле бензола (это первая практическая задача, к которой он был применен). Метод, используемый для расчета энергии кристаллов, в принципе не отличается от изложенного в работе [1]. Первый шаг состоит в том, чтобы сопоставить каждой заполненной молекулярной орбите (или волновой функции кристалла) возбужденное незанятое состояние, соответствующее тому же волновому вектору плюс некоторая добавочная величина, наличие которой приводит к изменению знака при переходе к соседнему атому. Далее следует составить сумму и разность первой функции и второй, умноженной на постоянный множитель. При этом получают две волновые функции, которые ведут себя в общем, как положено в кристалле, однако одна из них возрастает вблизи атомов с четными номерами, а другая — вблизи атомов с нечетными номерами. Если мы имеем линейную цепочку атомов или бензолное кольцо, то максимумы одной из этих альтернантных орбит отвечают атомам с четными номерами, а максимумы другой — атомам с нечетными (в этом случае метод применим только к кольцам с четным числом атомов). В объемноцентрированном кубическом кристалле, например в щелочном металле, одна альтернантная орбита должна иметь максимумы в центрах кубов, а другая — в вершинах.

Далее нужно построить детерминант, в котором орбиты одного типа заняты электронами с одной ориентацией спина, а орбиты другого типа — электронами с противоположной ориентацией спина. В этой связи данный метод иногда называют «методом различных орбит для разных спинов». Энергия, соответствующая детерминантной функции, вычисляется без труда. Дело в том, что по построению все орбиты одного типа взаимно ортогональны; следовательно, этим свойством обладают одноэлектронные функции (зависящие от пространственных и спиновых координат), и, как всегда в таких случаях, формула для полной энергии оказывается довольно простой. Выбрав параметр, определяющий степень чередования орбит различного типа, из условия минимальности энергии можно получить значительное улучшение по сравнению с методом Хартри — Фока. В некоторых из цитированных выше работ этот метод был применен к случаю бензола (с полным учетом конфигурационного взаимодействия); оказалось, что эта простая волновая функция дает

большую часть корреляционной энергии. Легко показать, что она приводит к правильному виду энергии связи для нейтральных атомов на больших расстояниях.

Описанная выше волновая функция не является собственной функцией оператора спина; диагонализуя оператор z -компоненты спина S_z , она оставляет недиагональным оператор S^2 и, следовательно, не соответствует синглетному состоянию. В работах [42–47] было показано, однако, что синглетное состояние можно получить из описанного выше детерминанта с помощью проекционного оператора. Кроме того, Лёвдин показал, что при неограниченном возрастании числа электронов в системе энергия синглетного состояния стремится к энергии, соответствующей данному детерминанту. Таким образом, в применении к кристаллу описанный выше простой метод расчета можно обосновать; с другой стороны, в случае молекулы бензола или другой аналогичной конечной системы этот метод нуждается в некоторой модификации. О природе используемой волновой функции будет несколько подробнее сказано в следующем параграфе.

В работах [53, 54] указанный метод был использован для расчета металлической формы водорода. Эта гипотетическая форма рассматривалась рядом авторов [55–58], и был сделан вывод, что при высоких давлениях (сотни тысяч атмосфер) металлическая модификация водорода (объемноцентрированная кубическая) оказывается более устойчивой, чем обычный кристалл, построенный из двухатомных молекул. В работе [59] был экспериментально обнаружен переход двухатомной формы в металлическую для довольно аналогичного случая иода. Результаты работ [53–55] находятся в довольно хорошем согласии друг с другом, хотя последняя выполнена методом ячеек. Случай водорода представляет интерес не только сам по себе, но и как упрощенный вариант проблемы, с которой приходится сталкиваться при рассмотрении щелочных металлов. Можно надеяться, что при дальнейшем развитии рассматриваемого метода будут получены теоретические результаты для щелочных металлов, и задача о корреляции получит более надежную трактовку, чем описано в § 3.

В конце данной главы приведены ссылки на работы, посвященные энергии связи ионных кристаллов и металлов.

§ 5. Метод альтернантных молекулярных орбит и антиферромагнетизм

Простая волновая функция, описанная в предыдущем параграфе в связи с задачей о щелочном металле, обладает тем свойством, что электроны с одной ориентацией спина стремятся

локализоваться на атомах, расположенных в центрах кубов объемноцентрированной кубической структуры (в которой кристаллизуются щелочные металлы), а электроны с другой ориентацией спина локализуются на атомах, находящихся в вершинах кубов. Рассматриваемое состояние отвечает меньшей энергии, чем та, которая получается по методу молекулярных орбит. Причина этого очень проста: при увеличении степени локализации электроны с противоположно направленными спинами будут встречаться друг с другом все реже и реже, в результате чего энергия электростатического отталкивания между ними будет уменьшаться; волновая функция будет описывать корреляцию между электронами с противоположно направленными спинами.

В то же время кинетическая энергия должна возрастать, поскольку электроны теперь не движутся по всему кристаллу, а в основном локализованы вблизи определенных атомов. В цитированных выше статьях исследовалась зависимость кинетической и потенциальной энергии от степени локализации, и было обнаружено, что с увеличением локализации кинетическая энергия, естественно, увеличивается, а потенциальная — уменьшается, в то время как полная энергия сначала убывает, достигает минимума при некоторой конечной степени локализации, а затем вновь возрастает. Степень локализации повышается с ростом межатомного расстояния, пока, наконец, не произойдет (при бесконечном расстоянии между атомами) полное разделение электронов с разными спинами и на каждом атоме не окажется по одному электрону. Именно это и приводит к образованию нейтральных атомов и к правильному значению энергии при бесконечном межатомном расстоянии.

В то же время с рассматриваемой волновой функцией связаны явления, не наблюдаемые на опыте. Как известно, существуют антиферромагнитные вещества, в которых спиновые магнитные моменты соседних атомов антипараллельны. К числу таких веществ относится многие соединения, а также некоторые элементы, в частности хром (обладающий, как и натрий, объемноцентрированной кубической решеткой). В последнем случае с помощью дифракции нейтронов было обнаружено антиферромагнитное упорядочение как раз того вида, который соответствует рассмотренной выше простой волновой функции: центры кубов заполнены электронами с одной ориентацией спина, а вершин — электронами с другой ориентацией. В атоме хрома вне заполненных $3s$ - и $3p$ -оболочек имеется шесть электронов. Можно предположить, что пять из них занимают $3d$ -орбиты, а шестой ($4s$) попадает в зону проводимости. Нечто подобное действительно получается из расчета энергетических зон.

Пять $3d$ -электронов в изолированном атоме (или ионе) хрома в соответствии с правилом Хунда обладают параллельными спинами. Можно ожидать, что в металлическом хроме с этими $3d$ -электронами будет связано антиферромагнитное упорядочение независимо от того, что происходит с электронами проводимости. Именно такое упорядочение и проявляется в дифракции нейтронов; однако вместо магнитного момента, соответствующего пяти параллельным спином (пять магнетонов Бора на атом), на опыте наблюдается лишь около одной десятой этой величины. Очень упрощенное объяснение этого факта на языке альтернантных молекулярных $3d$ -орбит состоит в том, что минимальная энергия получается при гораздо меньшей степени локализации, чем та, которая соответствует расположению всех положительных спинов в одних узлах, а всех отрицательных — в соседних.

Более полное исследование этого вопроса будет дано в следующем томе этой серии. Здесь следует лишь отметить, что в щелочных металлах такого рода антиферромагнетизм электронов проводимости экспериментально не наблюдался. Как согласовать это с видом волновой функции в методе альтернантных молекулярных орбит? Ответ нужно искать в учете конфигурационного взаимодействия, в силу которого представление волновой функции в виде одного детерминанта становится недостаточным. Как уже упоминалось, операция проектирования, выделяющая синглетную волновую функцию из рассматривавшегося выше детерминанта, приводит лишь к очень малому изменению энергии системы. Волновая функция ее, однако, при этом изменяется весьма значительно. В работе^[37] было показано, что действительно правильную волновую функцию основного состояния в данном случае можно получить, только существенно учитывая конфигурационное взаимодействие. Опишем конфигурации, которые нужно смешать с чисто антиферромагнитной. Разобьем кристалл на ряд доменов; внутри каждого из них имеет место полное антиферромагнитное упорядочение спинов, но при переходе от одного домена к другому фаза меняется, так что в домене противоположной фазы положительные и отрицательные спины меняются местами по сравнению с исходным. Внутри всех доменов энергия одна и та же, однако вблизи границ она несколько меняется, поскольку там появляются пары ближайших соседей с неправильной относительной ориентацией спинов. Если у границ находится небольшая часть всех атомов, то энергия будет почти такой же, как и в полностью антиферромагнитной структуре. Учет конфигурационного взаимодействия, типичного для истинного основного состояния, состоит в том, чтобы взять смесь многих волновых функций указанного типа.

Такая доменная структура должна нарушать дальний порядок, характерный для идеального антиферромагнетика. Если бы домены были достаточно малы, то дифракция нейтронов происходила бы так же, как и в случае малых образцов: линии дифракционной картины были бы столь уширены, что в них совсем нельзя было бы распознать обычных дифракционных линий. Поскольку в щелочных металлах дифракция нейтронов не обнаруживает антиферромагнитного дальнего порядка, следует признать, что там доменная, или мозаичная, структура «доведена до крайности»: ей отвечают домены, размеры которых едва ли больше нескольких атомных диаметров. Другими словами, на языке переходов от порядка к беспорядку, которые мы еще не успели рассмотреть, здесь нет дальнего порядка, а имеется лишь некоторый ближний порядок. Это приводит к ситуации, близкой к рассмотренной в начале предыдущего параграфа: вблизи электрона с заданной ориентацией спина повышена вероятность нахождения электронов с противоположными спинами; однако при переходе к большим расстояниям этот эффект скоро размывается. Иначе говоря, в щелочных металлах имеется некоторая тенденция к тому, чтобы спины электронов центрального атома и ближайших его соседей были антипараллельны, а спины электронов следующих соседей были ориентированы так же, как и в центральном атоме. Мы имеем здесь осциллирующее распределение спинов. Однако амплитуда осцилляций должна очень быстро убывать по мере удаления от центрального атома, так что по прошествии нескольких атомных расстояний электрон может с равной вероятностью иметь любое направление спина.

Такая ситуация, по-видимому, широко распространена, тогда как обнаруженный в хrome дальний порядок, приводящий к наблюдаемому антиферромагнетизму, представляет собой граздо менее общее явление. Такой антиферромагнетизм на малых расстояниях, вероятно, играет важную роль в установлении кристаллической структуры металлов. Объемноцентрированная кубическая решетка идеально подходит для чередующегося расположения спинов, характерного для антиферромагнетика. Гексагональная решетка, если она достаточно отличается от плотноупакованной структуры, допускает чередование лишь в некоторой степени, а гранецентрированная кубическая структура не допускает его совсем. Как было сообщено автору Корнишем¹⁾, эти факты замечательным образом коррелируют с наблюдаемой структурой кристаллов металлических элементов. Щелочные

¹⁾ A. J. Cornish, частное сообщение.

металлы с наполовину заполненной электронами s -оболочкой и элементы типа хрома с наполовину заполненной d -оболочкой стремятся образовать объемноцентрированную кубическую структуру. У этих элементов отдельные атомы должны обладать отличным от нуля магнитным моментом и потому рассмотренное выше антиферромагнитное упорядочение (на больших или малых расстояниях) должно быть весьма эффективным. Отступая от этих элементов в любом направлении в периодической таблице, мы приходим к веществам с гексагональной структурой. Наконец, в случае определенно немагнитных элементов, таких, как кальций с его заполненной $4s$ -оболочкой или инертные газы, мы чаще всего встречаемся с гранецентрированной кубической структурой. Эти факты, по-видимому, указывают на то, что у многих элементов периодической системы имеются признаки антиферромагнитного упорядочения, связанные с чувствительностью вида их волновой функции к корреляции между электронами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 1, Electronic Structure of Molecules, New York, 1963. (См. перевод: Дж. Слэтер, Электронная структура молекул, изд-во «Мир», 1965.)
2. Thomas L. H., Proc. Camb. Phil. Soc., **23**, 542 (1927).
3. Fermi E., Zs. Phys., **48**, 73 (1928).
4. Gombas P., Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Vienna, 1949. (См. перевод: П. Гомбаш, Статистическая теория атома и ее применения, ИЛ, 1951).
5. Leñz W., Zs. Phys., **77**, 713 (1932).
6. Jensen H., Zs. Phys., **77**, 722 (1932).
7. Jensen H., Zs. Phys., **101**, 164 (1936).
8. Jensen H., Zs. Phys., **81**, 611 (1933).
9. Jensen H., Zs. Phys., **82**, 794 (1933).
10. Jensen H., Zs. Phys., **89**, 713 (1934).
11. Jensen H., Zs. Phys., **93**, 232 (1935).
12. Jensen H., Zs. Phys., **101**, 141 (1936).
13. Jensen H., Zs. Phys., **110**, 277 (1938).
14. Jensen H., Meyer-Gossler G., Rohde H., Zs. Phys., **111**, 373 (1938).
15. Фок В. А., Phys. Zs. Sowjetunion, **1**, 747 (1932).
16. Hellmann H., Zs. Phys., **85**, 180 (1933).
17. Jensen H., Zs. Phys., **81**, 611 (1933).
18. Slater J. C., Krutter H. M., Phys. Rev., **47**, 559 (1935).
19. Slater J. C., Rev. Mod. Phys., **6**, 209 (1934).
20. Фейнберг Е. Л., Phys. Zs. Sowjetunion, **8**, 416 (1935).
21. Bloch F., Zs. Phys., **57**, 545 (1929).
22. Dirac P. A. M., Proc. Camb. Phil. Soc., **26**, 376 (1930).
23. Wigner E., Seitz F., Phys. Rev., **43**, 804 (1933).
24. Brillouin L., L'Atome de Thomas—Fermi, Actualités Sci. et Ind. № 160, 1934.

25. Slater J. C., Phys. Rev., **81**, 385 (1951).
26. Gaspar R., Acta Phys. Acad. Sci. Hung., **3**, 263 (1954).
27. Kohn W., Sham L. J., Phys. Rev. (в печати).
28. Wigner E., Seitz F., Phys. Rev., **43**, 804 (1933).
29. Wigner E., Seitz F., Phys. Rev., **46**, 509 (1934).
30. Wigner E., Phys. Rev., **46**, 1002 (1934).
31. Wigner E., Trans. Faraday Soc., **34**, 678 (1938).
32. Seitz F., The Modern Theory of Solids, New York, 1940. (См. перевод: Ф. Зейтц, Современная теория твердого тела, М., 1948).
33. Löwdin P. O., Journ. Chem. Phys., **19**, 1570, 1579 (1951).
34. Löwdin P. O., Arkiv Mat. Astron. Fis., **A35** (9) (1947).
35. Löwdin P. O., Arkiv Mat. Astron. Fis., **A35** (30) (1948).
36. Löwdin P. O., Adv. Phys., **5**, 1 (1956).
37. Slater J. C., Phys. Rev., **35**, 509 (1930).
38. Löwdin P. O., Symp. Mol. Phys. Tokyo, 1953, p. 13.
39. Löwdin P. O., Proc. 10th Solvay Conf., 1955, p. 71.
40. Löwdin P. O., Phys. Rev., **97**, 1474—1490, 1509 (1955).
41. Löwdin P. O., Journ. Appl. Phys., **33** (suppl. 1), 251 (1962).
42. Pauncz R., de Heer J., Löwdin P. O., Journ. Chem. Phys., **36**, 2247, 2257 (1962).
43. De Heer J., Journ. Chem. Phys., **37**, 2080 (1962).
44. De Heer J., Journ. Phys., Chem. **66**, 2288 (1962).
45. Pauncz R., Journ. Chem. Phys., **37**, 2739 (1962).
46. De Heer J., Rev. Mod. Phys., **35**, 631 (1963).
47. De Heer J., Pauncz R., Journ. Chem. Phys., **39**, 2314 (1963).
48. Swalen J. D., de Heer J., Journ. Chem. Phys., **40**, 378 (1964).
49. Moskowitz J. W., Journ. Chem. Phys., **38**, 677 (1963).
50. Moskowitz J. W., Barnett M. P., Journ. Chem. Phys., **39**, 1557 (1963).
51. Pauncz R., Molecular Orbitals in Chemistry, Physics, and Biology, New York, 1964.
52. Dermitt G., Phys. Rev., **127**, 1110 (1962).
53. Calais J. L., Arkiv Fys., **28**, 479, 511 (1965).
54. Calais J. L., Arkiv Fys., **29**, 255 (1965).
55. Wigner E. P., Huntington H. B., Journ. Chem. Phys., **3**, 764 (1935).
56. Kronig R., de Boer J., Korringa J., Physica, **12**, 245 (1946).
57. Bellemans A., de Leener M., Phys. Rev. Lett., **6**, 603 (1961).
58. Carr W. J., Phys. Rev., **128**, 120 (1962).
59. Alder V. J., Christian R. H., Phys. Rev., Lett., **4**, 450 (1960).
- 60*. Пайнс Д., Элементарные возбуждения в твердых телах, изд-во «Мир», 1965.
- 61*. Блохинцев Д. И., Введение в квантовую механику, изд-во «Высшая школа», 1961.
- 62*. Давыдов А. С., Квантовая механика, М., 1963.
- 63*. Соколов А. А., Лоскутов Ю. М., Тернов И. М., Квантовая механика, 2-е изд., М., 1965.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

к § 1

Модель Томаса — Ферми: [248, 307, 370, 376, 377, 442, 473, 528, 530—534, 536, 537, 628, 779, 803, 1098, 1980, 2094, 2160—2162, 2307—2309, 2315—2317, 2329—2334, 2781, 3473—3475, 4372, 4678, 4706].

к § 4

Энергия связи ионных кристаллов и металлов: [145, 146, 171, 172, 189—195, 205, 206, 208—210, 217, 220, 255, 260, 329, 331—335, 341, 345—349, 385, 400, 408, 418—420, 423, 437, 468—472, 476—478, 480, 486, 506—508, 510, 511, 516, 534, 536, 537, 541, 543, 546, 589, 593, 594, 599, 600, 607—617, 619, 621, 622, 624—626, 646, 647, 655—661, 664, 684, 686, 696—698, 710, 711, 713, 714, 739, 757, 767, 768, 771, 774, 776, 778, 783, 794, 799, 800, 812—814, 838, 839, 848—853, 866, 868, 870, 1180, 1186—1188, 1385, 1490, 1595, 1655, 1656, 1773—1776, 1795, 1796, 1831, 1848, 1954—1959, 1961—1963, 1986, 1995, 2043, 2062, 2095, 2150, 2151, 2172—2176, 2205, 2206, 2226, 2228, 2229, 2266—2268, 2318, 2322, 2600, 2700, 2701, 2711, 2712, 3321, 3345—3348, 3351, 3355, 3364—3366, 3505, 3667, 3677, 3727, 4100, 4182, 4229, 4667—4669, 4780, 4887, 4912].

КРИСТАЛЛ КАК ЗАДАЧА МНОГИХ ТЕЛ

§ 1. Сравнение одночастичного метода с многочастичным

Общий подход к исследованию электронной структуры кристалла, развитый в предыдущих главах, состоял в сведении задачи к одноэлектронной с помощью метода самосогласованного поля. В гл. 9 и 10, посвященных современной трактовке вопроса об энергии связи ионных кристаллов и металлов, пришлось рассмотреть и многоэлектронный аспект задачи, поскольку это оказалось необходимым для вычисления полной энергии кристалла. Мы, однако, не вдавались особенно глубоко в эту многочастичную сторону задачи о кристалле. В настоящей главе будет указано несколько способов подхода к решению этой проблемы, которые послужат основой для некоторых разделов следующего тома этой серии.

Мы, конечно, знакомы со стандартным методом сведения многочастичной задачи к одноэлектронной. Во-первых, используя приближение Борна — Оппенгеймера, мы разделяем движение ядер и движение электронов. Затем с помощью метода Хартри — Фока формулируются одноэлектронные уравнения для атомных волновых функций; при этом теорема Купменса позволяет отождествить одноэлектронные энергии, вычисленные в приближении Хартри — Фока, с потенциалами ионизации различных электронов (с обратным знаком). Рассматривая в предыдущих книгах этой серии теорию атомов и молекул, мы выяснили недостатки такого подхода; в принципе нам известно, как следует учитывать корреляцию электронов — либо посредством конфигурационного взаимодействия, либо включая в волновую функцию относительные координаты электронов r_{ij} . Обсудим, однако, эти вопросы более подробно и выясним, к чему это приводит в данной задаче о кристалле.

Представляют интерес задачи двух совершенно различных типов. Во-первых, как и в задаче об уравнении состояния, можно искать энергию связи как функцию положений ядер. Здесь существенно знать точное значение полной энергии. Конечно, мы получили бы его, если бы нам была известна точная волновая функция, но при настоящем несовершенном состоянии теории важно найти наиболее практичный способ получить хорошее приближение. В двух предыдущих главах при обсуждении во-

проса об энергии связи ионных кристаллов и металлов была сделана попытка рассмотреть указанную задачу. Мы отметили ряд недостатков в некоторых из современных методов теории металлов, хотя эти недочеты и не возникают в задаче об ионных кристаллах. Различия между двумя указанными случаями уходит корнями к соответствующей ситуации в молекулах. В нашей трактовке мы принимаем за исходное нечто аналогичное приближению Хартри—Фока, и затем переходим к его уточнению. Напомним (см. [1]), что для системы, состоящей из атомов или ионов с заполненными оболочками, подобно паре атомов гелия, приближение Хартри—Фока оказывается довольно точным. С другой стороны, для систем с ковалентной связью типа молекулы H_2 или металла или для такого ковалентного кристалла, как алмаз, нам известно, что детерминантная функция Хартри—Фока неправильно описывает ситуацию на больших межъядерных расстояниях. Это означает, что учет конфигурационного взаимодействия или другие эквивалентные методы трактовки корреляции в таких случаях значительно важнее, чем для ионных кристаллов. Мы упоминали о методе альтернативных молекулярных орбит применительно к случаю металлов типа щелочных. Для ковалентного кристалла типа алмаза можно надеяться использовать метод, эквивалентный принятому в работе [2] при рассмотрении ковалентных связей¹⁾ (этот метод был подробно рассмотрен в книге [1] применительно к молекулам). В сущности этот метод и был использован в известной работе [3] по теории кристалла-алмаза; при этом получились неплохие результаты. Они были повторены и обобщены в более поздней работе [4], где было показано, что они составляют удовлетворительную основу для расчета энергии ковалентного кристалла.

Задача другого типа, с которой мы сталкиваемся, относится к возбужденным состояниям кристалла. Сведения о них нужны для ряда задач — прежде всего для оптики. Исследуя переход от основного состояния к возбужденному при поглощении излучения, мы должны знать разности энергий рассматриваемых состояний. Это, однако, далеко не единственный пример; так, при рассмотрении теплоемкости твердых тел нужно взять функцию распределения по всем их возбужденным состояниям. Такая функция определяется больцмановским множителем $\exp\{-\text{(энергия)}/kT\}$, где «энергия» есть энергия возбуждения, отсчитанная от основного состояния. Вычисляя соответствующие средние значения, можно найти внутреннюю энергию, свободную энергию и

¹⁾ См. литературу, относящуюся к обобщенному методу валентных связей, в книге [1] (гл. 10, § 5, и приложение 14).

другие термодинамические величины, описывающие тепловые свойства вещества. Магнитные задачи также связаны с этими возбужденными состояниями, особенно когда речь идет о возбуждениях, энергии которых меняются в присутствии магнитного поля. Эти и другие явления, определяющиеся возбуждением системы, столь важны, что фактически большинство задач связано с исследованием возбужденных состояний, а не основного.

Нам необходимо исследовать возбуждения не только электронные, но и такие, которые связаны с колебательным движением систем ядер. Они, конечно, играют роль при рассмотрении теплоемкости решетки, а также проявляются и почти во всех эффектах иного рода. Например, как мы видели в гл. 1, задача об электропроводности весьма существенным образом связана с колебательным движением: рассеяние электронных волн колебаниями решетки составляет основной механизм возникновения электрического сопротивления. При оптическом поглощении также могут возбуждаться, помимо электронов, и колебания решетки, т. е. порождаются фононы. Почти во всех этих случаях определяющую роль играет взаимосвязь между движениями электронов и ядер, которая не учитывается в приближении Борна — Оппенгеймера. Последняя обусловлена малыми членами в гамильтониане, содержащими координаты как ядер, так и электронов (они приведены в книге [1], приложение 2). В приближении Борна — Оппенгеймера эти слагаемые отбрасываются. Они играют роль не только во многих задачах твердого тела, но также и в молекулярных задачах, касающихся взаимодействия электронных и ядерных колебательных состояний (эти эффекты обычно называются вибронными).

Возбужденные электронные состояния кристалла иногда имеют простой характер, но иногда очень сложны. Их сложная природа проявляется, например, в оптических свойствах кристаллов, содержащих ионы редкоземельных элементов. В этом случае $4f$ -электроны ионов столь надежно защищены остальной частью атома, что их свойства взаимодействия, отражающиеся на спектрах ионов, во многом такие же, как и у изолированных ионов; соответственно имеется далеко идущее сходство между спектрами этих ионов в кристаллах и в свободном состоянии. Здесь обнаруживается точка соприкосновения с теорией атомных мультиплетов, изложенной в работе [5]. Однако вследствие кристаллического окружения возникает и ряд отличий, приводящих к явлениям, которые обычно называются эффектами поля лигандов.

Мы указываем здесь лишь некоторые из многих типов задач, связанных с возбужденными состояниями кристалла. Их круг

настолько более обширен, чем совокупность задач, которые можно трактовать в одноэлектронном приближении, что они займут большую часть последнего тома этой серии. Читатель данной книги не может поэтому рассчитывать здесь больше чем на простое перечисление этих задач, рассмотрение общего способа их исследования, а также указание рамок относительно ограниченной области явлений, которые можно трактовать, не обращаясь к последовательному многочастичному подходу. Естественно, как и в случае с моделью центральносимметричного поля, в случае атома необходимо разобрать одноэлектронную задачу, прежде чем всерьез браться за многочастичное рассмотрение. Именно по этой причине мы и посвящаем настоящий том одноэлектронной трактовке. Можно считать, что наше рассмотрение в известном смысле параллельно гл. 8 книги [5]. Содержание следующего тома будет служить аналогом рассмотрения мультиплетов и других атомных задач, изложенных в последующих главах цитированной работы.

Напомним, что, несмотря на весьма неудовлетворительный характер одноэлектронного подхода, в случае атома он все же дает удивительно точное описание системы с помощью теоремы Купменса или, в более общем смысле, с помощью интерпретации одноэлектронных энергий как энергий возбуждения или ионизации различных электронов атома. Иначе говоря, эти одноэлектронные энергии дают довольно хорошее приближение для разности энергий основного и возбужденного состояний атома. Аналогично одноэлектронная теория кристалла использует значения одноэлектронных уровней для приближенного расчета энергий возбуждения электронов в кристалле. В следующем параграфе мы проанализируем ряд примеров, показывающих, когда это можно сделать, а затем рассмотрим вопрос о том, какую одноэлектронную задачу следует решить для того, чтобы получить наилучшее согласие одноэлектронных энергий с энергиями возбуждения. Нужно ли применять метод самосогласованного поля или, может быть, использовать некоторую его модификацию?

§ 2. Одноэлектронные энергии и электронное возбуждение

Наиболее характерный пример использования одноэлектронных энергий для описания электронного возбуждения в кристаллах мы встречаем в задачах, связанных со статистикой Ферми. При этом предполагается, что имеется газ невзаимодействующих частиц, подчиняющихся принципу запрета Паули, но находящихся в произвольном внешнем поле, так что расположение

их энергетических уровней может быть каким угодно. Эти условия включают, в частности, и случай периодического потенциала, рассматриваемый нами, с его характерной группировкой энергетических уровней в зоны. Понимая статистику Ферми буквально, мы должны вычислять энергию всего кристалла как сумму одноэлектронных энергий. Однако мы полностью отдаем себе отчет в том, что полная энергия системы в приближении Хартри — Фока не равна сумме одноэлектронных энергий. Имеются и другие члены (обусловленные взаимодействием между парами электронов), которые входят в выражение для полной энергии, существенно изменяя его. Поэтому нельзя считать, что статистика Ферми, лежащая в основе всей современной теории полупроводников и металлов, вытекает каким-либо непосредственным образом из основных постулатов многоэлектронной теории. Этот серьезный пробел в логическом обосновании теории остался незамеченным многими исследователями, работающими в физике твердого тела¹⁾.

Тем не менее метод работает вполне удовлетворительно, и поэтому следует ожидать, что для малых энергий возбуждения, которыми мы обычно интересуемся, энергию возбуждения действительно можно выразить в виде суммы одноэлектронных членов, причем приближение оказывается значительно лучшим, чем можно было бы предполагать на первый взгляд. В полупроводнике, например, при довольно низкой температуре сравнительно немного электронов будет возбуждено из валентной зоны в зону проводимости. Эти возбужденные электроны будут находиться в среднем далеко друг от друга. Поэтому их в хорошем приближении можно рассматривать как независимые. Эффекты взаимодействия возбужденных электронов и дырок становятся существенными лишь тогда, когда два или более возбужденных электронов или дырок или электрон и дырка оказываются вблизи друг от друга. Эти случаи следует рассматривать отдельно; исключая их, можно с хорошим приближением рассматривать энергию возбуждения кристалла как сумму энергий отдельных возбужденных электронов (хотя вместе с тем полная энергия кристалла отнюдь не равна сумме одноэлектронных энергий всех электронов).

В отдельных упрощенных случаях удается показать, что это приблизительно верно: энергию возбуждения можно записать в виде суммы одноэлектронных энергий. В приложении 13 книги [1] была рассмотрена задача о кольце из шести атомов водорода как весьма упрощенной модели одномерного кристалла.

¹⁾ В настоящее время этот подход получил точное обоснование с помощью современных методов теории многих тел. — *Прим. ред.*

Эта задача достаточно проста, так что по методу конфигурационного взаимодействия можно выполнить приближенный расчет, близкий к точному рассмотрению мультиплетов, связанных с различными возможными возбужденными состояниями электронов. В схеме молекулярных орбит в основном состоянии шесть электронов находятся на трех уровнях с самой низкой энергией, так что низшие состояния в энергетической зоне заполнены, а верхние свободны. Мы рассматриваем, однако, все возможные возбуждения, при которых шесть электронов остаются в той же энергетической зоне, способной вместить 12 электронов. Этим возбуждениям отвечает множество мультиплетов; любой из них можно описать с помощью квантовых чисел заполненных молекулярных орбит. Эти квантовые числа в данном случае аналогичны компонентам вектора \mathbf{k} в теории энергетических зон. Полная трактовка задачи о всех этих мультиплетах на основе метода конфигурационного взаимодействия описана в указанном выше приложении книги [1].

В этом приложении, в частности в § 2, приведены результаты одноэлектронного приближения. Иными словами, мы приписываем значения энергии каждому из состояний энергетической зоны и сравниваем сумму этих энергий, соответствующих заполненным состояниям, со взвешенным средним значением энергии мультиплетов, возникающих, как следует из расчета по методу конфигурационного взаимодействия, когда эти состояния заполнены. Результат сравнения, обсуждаемый в указанном параграфе и изображенный графически на фиг. П13.2 для низших возбужденных уровней, сводится к тому, что сумма одноэлектронных энергий дает удивительно хорошее приближение для этого взвешенного среднего значения энергии. Как указывалось в том же приложении, невозможно каким-либо строгим образом априори доказать, что это согласие должно было получиться. Оно определяется, по-видимому, случайными совпадениями значений различных обменных интегралов, что невозможно предсказать заранее. Тем не менее совпадение оказывается как раз того типа, какое требовалось бы для рассмотрения этой задачи о шести атомах водорода с помощью статистики Ферми.

Причина, по которой эта задача с подробным решением была включена в книгу [1], состоит в том, что это единственный известный автору случай, когда в задаче того же типа, что и в теории твердого тела, оказалось возможным довести многоэлектронную трактовку до конца (в данном случае с помощью довольно громоздкого расчета по методу конфигурационного взаимодействия). Можно было бы попытаться рассмотреть и несколько более длинную цепочку атомов или исследовать

модельную систему очень малых размеров, имитирующую двумерные или даже трехмерные кристаллы, но число мультиплетов, которые при этом необходимо учесть, чрезвычайно быстро возрастает до астрономических величин с увеличением числа атомов системы. Поэтому весьма вероятно, что нам не удастся заметно продвинуться вперед в вопросе об обосновании применимости одноэлектронных энергий при исследовании задач теории кристаллов.

Итак, примем просто как эмпирический факт то обстоятельство, что статистика Ферми и одноэлектронный подход приводят к хорошим результатам при рассмотрении многих свойств полупроводников и металлов. Это означает, что по крайней мере низшие возбужденные состояния истинной многоэлектронной задачи можно в довольно точном приближении охарактеризовать суммами одноэлектронных энергий. В таком случае поставим следующие вопросы. Какие одноэлектронные энергии следует использовать? Определяются ли они теоремой Купменса? Мы выясним вскоре, что это не так. В случае H_6 значения одноэлектронных энергий, которые приводятся к хорошему согласию с многоэлектронными уровнями, не получаются из уравнений Хартри—Фока для основного состояния цепочки H_6 . Скорее здесь нужны возбужденные состояния электронов.

Напомним, что, поскольку кольцо состоит из шести атомов, в энергетической зоне имеется шесть состояний, и им, как описано в цитированном выше приложении 13, приспаны квантовые числа $m = 0, \pm 1, \pm 2, 3$. Самыми нижними являются состояния $0, \pm 1$, заполненные в основном состоянии системы, а состояния $\pm 2, 3$ при этом остаются пустыми. Однако для отыскания одноэлектронных энергий, суммы которых дают энергии возбужденных состояний, мы использовали конфигурацию, в которой в каждом из состояний находится по одному электрону с одинаковым спином. Это дает только одну детерминантную функцию, единственную, которой соответствуют шесть параллельных спинов электронов. Одноэлектронные уровни, определяемые для этой конфигурации, обладают тем свойством, что они довольно плавно распределены по энергиям. В приложении 13 книги [1], табл. П13.4, приведены следующие значения одноэлектронных энергий (в ридбергах):

$$\begin{array}{ll}
 m = 0, & -2,882690 \\
 m = \pm 1, & -1,738612, \\
 m = \pm 2, & 0,378952, \\
 m = 3, & 3,808346.
 \end{array} \tag{11.1}$$

Разности энергий, равные 1,144078, 2,117564 и 3,429394 ридберга, составляют правильную прогрессию. С другой стороны, если бы

мы использовали основное состояние, то два заполненных уровня с $m=0, \pm 1$ были бы близки друг к другу, будучи отделены от пустых уровней щелью большей величины, и свойство аддитивности уже не имело бы места. Это явление имеет фундаментальное значение, и мы обсудим его в следующем параграфе.

§ 3. Одноэлектронные энергии в приближении Хартри—Фока

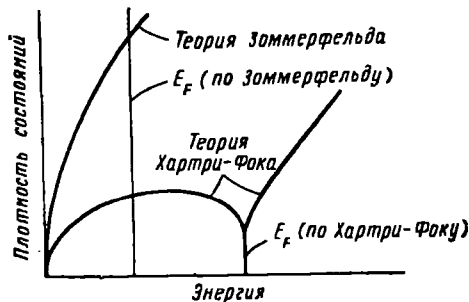
В методе Хартри—Фока каждый электрон движется в поле ядер и всех электронов (включая и его самого) за вычетом обменного поля. Последнее отвечает ферми-дырке, т. е. распределению заряда, которое движется вместе с рассматриваемым электроном; суммарный заряд в этом распределении равен одному электронному заряду, если рассматривается заполненная орбита, и нулю в случае возбужденной орбиты. Именно это различие в полях, действующих на электроны в заполненных и возбужденных орбитах, и оказывается существенным в данном случае. Энергия электрона, естественно, меньше, если он не испытывает отталкивания со стороны электронного заряда, локализованного в ферми-дырке. Следовательно, энергии заполненных орбит понижаются по сравнению с возбужденными. Это приводит к отталкиванию заполненных и незаполненных уровней друг от друга, что в результате обуславливает уменьшение числа уровней в окрестности энергии Ферми.

Это ясно видно в расчетах одноэлектронных энергетических уровней в молекулах. В книге [1] (гл. 6, § 2) при рассмотрении одноэлектронных энергетических уровней двухатомных молекул мы привели примеры такой ситуации. При переходе от одной молекулы к другой, с более тяжелыми ядрами, некоторые энергетические уровни, возбужденные в более легких молекулах, становятся заполненными в тяжелых. В этот момент, как показано на фиг. 6.1 цитируемой книги, энергетический уровень внезапно резко падает, уменьшаясь на значительную величину.

Аналогичный эффект обнаружен и в металле в рамках модели свободных электронов. Формула (10.7) дает выражение для обменного потенциала, действующего на электрон из распределения Ферми. Это выражение пропорционально функции импульса $F(\eta)$, которая изменяется от единицы на дне распределения Ферми до $1/2$ на вершине его и далее до нуля в области возбужденных состояний. Таким образом, учитывая, что обменная энергия отрицательна, мы видим, что уровни нижней части распределения понижены на максимальную величину, уменьшающуюся с подъемом по энергии к возбужденным состояниям.

Это ведет к обеднению плотности состояний в окрестности уровня Ферми, где наклон кривой $F(\eta)$ становится вертикальным. На фиг. 11.1 показана рассчитанная Реймсом [6] плотность состояний системы свободных электронов с учетом этой обменной поправки. Видно, что плотность состояний уже не пропорциональна квадратному корню из энергии, как получилось бы для свободных электронов без обмена, согласно формуле (1.13), а уменьшается до нуля на уровне Ферми.

Этот результат находится в очевидном противоречии с экспериментальными данными. Мы указывали в связи с формулой (1.14), что энергия теплового возбуждения электронов



Фиг. 11.1. Плотность состояний свободного электронного газа (по Реймсу [6]).

Верхняя кривая соответствует теории Зоммерфельда. Нижняя кривая отвечает теории Хартри-Фока в предположении, что обменная энергия задается выражением (10,7), содержащим зависимость от импульса. В отношении эксперимента модель Зоммерфельда значительно ближе к реальной ситуации, чем модель Хартри-Фока.

пропорциональна плотности состояний на уровне Ферми. Если бы плотность состояний была такой, как изображено на фиг. 11.1, теплоемкость была бы значительно меньше, чем для газа свободных электронов без обмена. Последняя модель, однако, приводит к значениям электронной теплоемкости, которые в общем согласуются с опытом. Отсюда следует, что нельзя описать экспериментальные данные, представляя полную энергию электронного возбуждения в кристалле просто в виде суммы одноэлектронных энергий того типа, который приводит к фиг. 11.1. Необходимо использовать нечто более похожее на энергетические уровни электронов в обычном периодическом потенциале, пренебрегая обменом или по меньшей мере пренебрегая зависимостью обменной поправки от вектора k .

На объяснение этого парадокса, связанного с теорией свободных электронов в металле, были затрачены немалые усилия. Ниже мы вернемся к некоторым из этих попыток. По мнению

автора этой книги, нам, однако, и не требуется искать какого-нибудь глубокого и серьезного объяснения. Как только что указывалось, нельзя ожидать, что энергию возбужденного состояния электронного газа удастся записать в виде суммы одноэлектронных энергий, вычисленных в приближении Хартри—Фока. Так, в случае H_6 эмпирическое согласие между суммой одноэлектронных энергий и значением энергии возбужденного состояния многоэлектронной системы можно получить, только если использовать набор одноэлектронных энергий, весьма далеких от основного состояния. В частности, одноэлектронные энергии, использованные в предыдущем параграфе, относятся к конфигурации электронов, в которой каждое из состояний энергетической зоны занято одним электроном. В таком случае не будет разницы в обменных поправках для верхних и нижних уровней энергетической зоны; все они заполнены в равной мере. Поэтому описанный выше провал в плотности состояний на уровне Ферми не возникает.

Следовательно, при построении набора одноэлектронных энергий для последующего использования в статистике Ферми следует избегать того, чтобы обменный эффект изменялся при переходе от одной части энергетической зоны к другой. Другими словами, именно зависимость энергии обмена от k составляет ту черту метода Хартри—Фока, которая делает одноэлектронные энергии, определяемые по этому методу, не подходящими для использования в статистике Ферми. Фактически результаты окажутся гораздо ближе к опыту, если отбросить это кажущееся улучшение, осуществляемое в рамках метода Хартри—Фока, и использовать простую обменную поправку, зависящую только от пространственных координат, но не от k ¹⁾.

В этом, вероятно, и кроется объяснение значительного успеха, достигнутого при использовании либо уравнения Шредингера, в котором обменная поправка Хартри—Фока заменяется ее взвешенным средним значением, либо еще более простого приближения, в котором поправка зависит только от корня кубического из плотности электронов. Последний метод (см. [5]) сводится к использованию среднего обменного потенциала (10.7) с заменой функции $F(\eta)$ ее средним значением $^{3/4}$. Это упрощенное уравнение Хартри—Фока было использовано в работе [7] при вычислении волновых функций и энергетических уровней нейтральных атомов. Оно использовалось также [8] для нахождения релятивистских волновых функций и уров-

¹⁾ Как показали исследования последнего десятилетия, дело обстоит, по-видимому, несколько иначе: надо не пренебрегать зависимостью обменной энергии от k , а вычислять ее с учетом экранирования межэлектронного взаимодействия (см. [2240, 2241]). — *Прим. ред.*

ней энергии. В последнем расчете было получено замечательное совпадение между вычисленными значениями одноэлектронных энергий и экспериментальными данными по рентгеновским спектрам на протяжении всей периодической системы элементов. Возникает впечатление, что в части, касающейся расчета одноэлектронных энергий изолированных атомов, описанные методы так же хороши, как и метод Хартри — Фока, а возможно, и лучше. В добавление к этому отметим, что практически все сделанные до сих пор расчеты энергетических зон используют этот упрощенный обменный потенциал. Совершенно поразительно, насколько хорошим оказывается совпадение различных характеристик энергетических зон, вычисленных и определенных по экспериментальным данным различного типа. Отнюдь не желая переоценивать применение не зависящего от k обменного потенциала, мы должны все же отметить, что, по-видимому, именно эта процедура ответственна за успех вычислений.

Приведенные нами соображения носят, однако, лишь качественный характер. Возможно, они такими и останутся. Иначе говоря, по-видимому, нелегко априори сформулировать рецепт задания такого потенциала, чтобы решения уравнения Шредингера с ним давали одноэлектронные энергии, более всего подходящие для дальнейшего использования в задачах статистики¹⁾. Можно, однако, дать общее описание проблемы, которое убедит нас в том, что потенциал должен заметно отличаться от потенциала Хартри — Фока. Это будет сделано в следующем параграфе.

§ 4. Потенциал в одноэлектронной задаче Шредингера

На раннем этапе развития волновой механики имела место обширная дискуссия относительно наилучшего выбора формы потенциала в задаче о движении электрона в атоме щелочного металла. Еще до создания волновой механики были выяснено, что можно ввести потенциал, при котором квантованные энергетические уровни электрона весьма удовлетворительно согласуются с уровнями энергии щелочного атома. Справедливость этого была доказана в волновой механике. Хорошо известный потенциал Прокофьева [9] для натрия был определен не с помощью какого-либо метода самосогласованного поля, а чисто эмпирически — так, чтобы значения электронных уровней согласовывались с экспериментальными данными.

При введении такого потенциала обнаруживается одна черта, отсутствующая в решении Хартри—Фока. Это поляризация

¹⁾ Серьезные успехи в этой области были достигнуты с помощью метода псевдопотенциала [29]. — *Прим. ред.*

атомного остова валентным электроном. Пусть валентный электрон в атоме, скажем, натрия находится на некотором расстоянии от атомного остова, состоящего из ядра и 10 электронов иона Na^+ , тогда он будет создавать электрическое поле, действующее на ион Na^+ и поляризующее его так, чтобы отодвинуть электронные оболочки прочь от валентного электрона. Это в свою очередь приведет к образованию диполя, действующего на валентный электрон. Действительно, центр массы у отрицательно заряженного облака электронов сдвинется, и облако будет отталкивать валентный электрон менее сильно, чем его притягивает ядро. Легко выяснить, как зависит результирующее притяжение от расстояния r между валентным электроном и ядром. Поле валентного электрона будет пропорционально $1/r^2$. Оно создает дипольный момент, пропорциональный своей величине. Диполь создает потенциал, в удаленных точках пропорциональный $1/r^2$, а так как сам дипольный момент пропорционален $1/r^2$, это дает потенциал притяжения, пропорциональный в точке расположения валентного электрона величине $1/r^4$. Этот поляризационный эффект не учитывается в методе Хартри—Фока. Обсуждение его с точки зрения усовершенствования метода Хартри—Фока было дано в работе [10].

Причина, по которой эффект поляризации выпадает в приближении Хартри—Фока, состоит в том, что по существу он представляет собой корреляционный эффект. Он отражает стремление внутренних электронов «уйти с дороги» валентного электрона. Если последний проникает внутрь остова, как это иногда происходит в натрии, то такая тенденция внутренних электронов освободить путь валентному электрону проявляется хорошо известными способами. Другие электроны с тем же значением спина, что и у валентного электрона, будут двигаться вокруг окружающей его ферми-дырки, в то время как электроны с противоположным значением спина будут стремиться уйти прочь вследствие эффекта корреляции. Иными словами, хотя поляризация приводит к появлению в потенциале члена, пропорционального $1/r^4$ на больших расстояниях, на малых расстояниях ее влияние сводится к вполне известным эффектам. Последние, однако, также обусловлены корреляцией, не учитываемой в приближении Хартри—Фока.

Другой аналогичный пример, когда в потенциале появляется член, отсутствующий в рамках приближения Хартри—Фока, можно найти в известной задаче о силе изображения у поверхности металла. В элементарной электростатике исследуется потенциал точечного заряда, например электрона, на некотором расстоянии от плоской поверхности идеального проводника. Последняя, очевидно, должна быть эквипотенциальной. Как

известно из электростатики, это приводит к тому, что электрическое поле вне проводника совпадает с полем, которое создавалось бы внешним электроном и его так называемым электрическим изображением, т. е. воображаемым зарядом противоположного знака, находящимся внутри проводника на том же расстоянии от поверхности, что и электрон снаружи. Для таких двух зарядов поверхность проводника будет эквипотенциальной. В действительности, конечно, никакого заряда внутри проводника нет; заряд, создающий поле изображения во внешней области, размещается фактически на поверхности проводника, причем величина поверхностной плотности его равна скачку нормальной компоненты электрического поля на поверхности. Этот поверхностный заряд должен быть положительного знака, если снаружи расположен электрон, заряженный отрицательно. Интересуясь детальным механизмом возникновения этого поверхностного заряда, можно установить, что фактически он создается за счет ухода электронов проводника из области металлической поверхности, лежащей под внешним электроном. Иными словами, это поляризационный эффект, не отличающийся в принципе от поляризации атомного остова валентным электроном, которую мы рассмотрели выше. Энергия, соответствующая этой силе изображения, составляет основную часть контактной разности потенциалов на поверхности проводника, и без учета ее невозможен расчет никакого явления у поверхности металла. Тем не менее, подобно другим поляризационным эффектам, этот эффект полностью выпадает из расчета в приближении Хартри — Фока.

Эти примеры должны убедить читателя в том, что если мы хотим найти потенциал, для которого энергетические уровни и волновые функции отдельного электрона будут возможно лучше отражать его поведение в реальном атоме или в металле, то следует использовать потенциал, заметно отличающийся от потенциала приближения Хартри — Фока и учитывающий поляризацию. Приведем еще один пример, на этот раз из физики полупроводников. Нередко (см. гл. 2, § 5, и приложение 2) возникает необходимость рассмотреть примесный атом в полупроводнике, скажем атом мышьяка в кристалле германия. Заряд ядра мышьяка на единицу больше, чем у германия. Поэтому мы могли бы описать примесь, просто считая, что на ядро примесного атома помещен избыточный положительный заряд, равный по величине заряду электрона. Это приведет к возникновению внешнего поля во всем объеме кристалла германия, в результате чего возникнут возмущенные волновые функции хорошо изученного вида. Из опыта, однако, известно, что германий обладает довольно большой диэлектрической проницаемостью, которой, как мы

знаем из курса электростатики, обратно пропорционально электрическое поле в диэлектрике. Поэтому в качестве поля, в котором требуется найти волновые функции электронов в окрестности примесного атома, следует взять поле положительного заряда в среде с большой диэлектрической проницаемостью. Расчет, выполненный таким способом, дает картину примесных энергетических уровней, хорошо согласующуюся с опытом. Но этот диэлектрический эффект, равно как и все поляризационные эффекты, исключен из рассмотрения в приближении Хартри—Фока. Соответственно последнее привело бы к совершенно неверному ответу в рассматриваемой задаче о примеси.

Нетрудно сформулировать рецепт отыскания потенциала, который ведет себя должным образом во всех описанных случаях. Чтобы найти потенциал, действующий на электрон в квантово-механической системе, предположим, что нам известна полная, точная волновая функция, которая будет, конечно, учитывать все поляризационные эффекты, исключаемые из рассмотрения в приближении Хартри—Фока. Будем считать, что один из электронов находится в интересующей нас точке пространства. При фиксированном его положении волновая функция будет давать вероятность нахождения других электронов в произвольных точках пространства. Используя волновую функцию, вычислим плотность других электронов в каждой точке пространства. Если волновая функция есть $\psi(x_1 \dots x_N)$, где величины $x_1 \dots x_N$ указывают координаты (и значения спина) N электронов, и если координаты первого электрона равны x_1 и надо найти плотность других электронов в точке x_2 , то искомая величина будет пропорциональна интегралу $\int \psi^* \psi dx_3 dx_4 \dots dx_N$, где интегрирование проводится по координатам всех других электронов с номерами 3, ..., N . Ввиду антисимметрии волновой функции ответ не зависит от того, интегрируем ли мы по $x_3 \dots x_N$ или по любому другому набору $N - 2$ электронных координат. Найденная величина будет давать вероятность найти электрон 2 в точке x_2 при условии, что электрон 1 находится в точке x_1 . Поскольку фактически, помимо первого, имеется $N - 1$ электронов, полная плотность заряда в точке x_2 будет пропорциональна величине

$$(N - 1) \int \psi^* \psi dx_3 \dots dx_N. \quad (11.2)$$

В определенной таким образом плотности заряда других электронов обязательно должны проявляться различные поляризационные эффекты, обсуждавшиеся выше, поскольку по предположению ψ есть точная волновая функция задачи. Найдем затем потенциал в точке x_1 , обусловленный как ядрами, так и этим распределенным электронным зарядом, плотность которого

параметрически зависит от x_1 . Это даст нам потенциал, который будет зависеть только от положения первого электрона, но не от его импульса или волнового вектора \mathbf{k} и потому не будет приводить к парадоксальной зависимости от \mathbf{k} , которая, как мы видели, появляется в случае потенциала Хартри—Фока. Кроме того, здесь будут учтены и поляризаационные эффекты, описанные выше.

По-видимому, потенциал, определенный указанным образом, был бы в значительно большей степени, чем потенциал Хартри—Фока, пригоден для нахождения одноэлектронных волновых функций и энергий. Этот потенциал был предложен некоторое время назад автором [11] в качестве почти идеального типа потенциала самосогласованного поля. Фактически подобная идея была использована значительно раньше [12] при рассмотрении задачи об атоме гелия, еще до того, как был предложен метод самосогласованного поля. Предполагалось, что положение одного электрона фиксировано на заданном расстоянии от ядра, и исследовалось движение другого электрона в поле этого фиксированного электрона и ядра. Эта задача может быть решена точно с помощью тех же методов, что и используемые в задаче о H_2^+ . Определяемая в результате энергия, зависящая от положения первого электрона, использовалась затем в качестве потенциала в задаче с центральносимметричным полем. Энергия основного состояния этой задачи об одном электроном в центральном поле дает довольно удовлетворительное приближение для величины потенциала ионизации (с обратным знаком) одного из электронов в основном состоянии атома гелия.

Аналогичный подход был использован Вигнером [13, 14] при обсуждении вопроса о корреляции электронов в металле. Вигнер предполагал, что электроны с одним значением спина удерживаются в фиксированных положениях, а электроны с противоположным значением спина, отталкиваемые первыми, движутся среди них. Именно таким путем Вигнер получил в предельном случае высокой плотности указанное выше выражение для корреляционной энергии (10.29).

Самосогласованный потенциал, описанный в настоящем параграфе, не очень сильно отличается от потенциала Хартри—Фока. Не велико будет и различие в получающихся при таком потенциале орбитальных волновых функций. Свойства их рассматривались Лёвдином [15, 16], который показал, что эти функции похожи на те, что Лёвдин назвал естественными спин-орбитальными функциями. Последние определяются следующим образом. В качестве исходного берется произвольный полный набор ортонормированных одноэлектронных спин-орбитальных функций $u_i(x_1 \dots x_N)$ N -электронной системы (переменные x включают

как координаты, так и спин). Выбирая произвольным образом любые N из этих спин-орбитальных функций и считая, что соответствующие состояния заполнены электронами, мы образуем из них всевозможные детерминантные функции. Истинную волновую функцию можно точно записать в виде линейной комбинации бесконечного числа этих детерминантов. С помощью этой волновой функции ψ нужно составить так называемую первую матрицу плотности

$$\int \psi^* \psi dx_2 \dots dx_N, \quad (11.3)$$

дающую распределение плотности частицы 1. Нетрудно показать, что эту величину можно записать в виде

$$\sum_{i,j} C_{ij} u_i^*(x_1) u_j(x_1). \quad (11.4)$$

Здесь коэффициенты C_{ij} образуют матрицу, зависящую от конкретного выбора функций u_i . При унитарном преобразовании функций u_i величины C_{ij} подвергаются преобразованию подобия. Последнее можно выбрать так, чтобы матрица C_{ij} оказалась диагональной. Получающиеся в результате выполнения этой процедуры спин-орбитальные функции и называются естественными.

В цитированных работах Лёвдин исследовал ряд свойств естественных спин-орбитальных функций. В первую очередь он рассмотрел разложение волновой функции ψ в ряд по детерминантным функциям, составленным из u_i . Обычно главный член этого ряда дается одной детерминантной функцией, а другие входят с небольшими коэффициентами. Лёвдин показал, что при использовании естественных спин-орбитальных функций получающийся ряд сходится быстрее, чем при любом другом выборе спин-орбитальных функций. Этот критерий не совпадает в точности с критерием приближения Хартри—Фока, согласно которому энергия, соответствующая отдельной детерминантной функции, должна быть ниже, чем для любого другого детерминанта. Поэтому естественно, что он приводит к несколько иным спин-орбитальным функциям. Естественные спин-орбитальные функции были весьма подробно исследованы в различных простых случаях¹⁾, и было выяснено, что они очень похожи на спин-орбитальные функции приближения Хартри—Фока, но не идентичны им.

Лёвдин проанализировал далее условия, которым должны удовлетворять естественные спин-орбитальные функции, подобно

¹⁾ См., например, [17].

тому, как это делается для уравнений Хартри — Фока. Он показал, что эти функции не дают точного решения уравнения Шредингера для частицы, движущейся в поле, которое зависит только от пространственных координат. Однако если мы хотим найти потенциал, зависящий только от координат и такой, что волновые функции в нем будут давать возможно лучшее приближение к естественным спин-орбитальным функциям, то, как показал Лёвдин, соответствующий потенциал будет как раз тем, который был описан выше в этом параграфе при обсуждении формулы (11.2). Таким образом, рекомендуемые нами потенциал и спин-орбитальные функции дают вполне удовлетворительное приближение для естественных спин-орбитальных функций и для задачи Шредингера, решениями которой они являются. Спин-орбитальные функции, как явствует из вышеизложенного, будут отличаться от функций Хартри — Фока тем, что в них будут учтены поляризационные и связанные с ними эффекты. Возможно, что однодетерминантная функция, образованная из N спин-орбитальных функций наименьшей энергии, будет отвечать и не минимальной полной энергии и, следовательно, не будет вполне совпадать с детерминантной функцией приближения Хартри — Фока. Тем не менее она будет обладать тем свойством, что в разложении точной волновой функции по детерминантным она будет служить первым членом наиболее быстро сходящегося ряда. Иначе говоря, она будет первым членом наиболее быстро сходящейся последовательности в методе конфигурационного взаимодействия, который можно использовать для определения истинной волновой функции.

Самосогласованный потенциал, описываемый в настоящем параграфе, представляется определенно более пригодным для рассмотрения кристаллических задач, чем потенциал приближения Хартри — Фока. Он обладает, однако, тем недостатком, что для определения его нужно предварительно знать полную волновую функцию с учетом поляризационных эффектов. Иными словами, у нас нет способа непосредственного его вычисления. По этой причине любое применение описанного метода в ближайшем будущем будет основываться скорее всего на использовании приближений, до некоторой степени интуитивных. В качестве исходного будет выбираться потенциал типа Хартри — Фока, модифицированный включением обменной поправки, пропорциональной корню кубическому из плотности заряда. Затем будут оцениваться поляризационные поправки, для чего можно использовать взятые из опыта или рассчитанные значения поляризуемостей, диэлектрических проницаемостей и тому подобных величин. Действуя таким образом, можно будет найти приближенное выражение для потенциала, который далее можно ис-

пользовать при решении уравнения Шредингера для задачи об энергетических зонах. Вопросы, связанные с поляризуемостью и диэлектрической проницаемостью, подробно рассмотрены в приложении 5.

Прежде чем двигаться дальше, необходимо указать, что выбор потенциала в задаче о самосогласованном поле еще не является решающим. Может возникнуть необходимость в продолжении расчета с выходом за рамки одноэлектронного приближения путем учета конфигурационного взаимодействия или каким-нибудь другим методом. Одноэлектронная задача, приводящая к одноэлектронным энергиям и спин-орбитальным функциям, составит при этом лишь первое приближение, и спин-орбитальные функции будут использованы для построения приближенных многоэлектронных функций. Последние обычно будут строиться по методу конфигурационного взаимодействия из детерминантов, составленных из спин-орбитальных функций. Эти функции таким образом образуют просто базис, и если расчет по методу конфигурационного взаимодействия доведен до достаточно далекого этапа, то окончательный результат независимо от конкретного характера спин-орбитальных функций будет одним и тем же. Выбор лучших спин-орбитальных функций диктуется только условием возможно быстрой сходимости решения, т. е. желанием извлечь как можно больше уже из самих спин-орбитальных функций без дальнейшего рассмотрения конфигурационного взаимодействия. С этой точки зрения начинать можно либо с функций Хартри—Фока, либо со спин-орбитальных функций, определяемых по методу, описанному в настоящем параграфе. Однако, как уже подчеркивалось, в статистических задачах лучшее приближение дают одноэлектронные энергии, соответствующие нашим спин-орбитальным функциям, а не функциям Хартри—Фока. Как показал Лёвдин, именно при этом получается самая быстрая сходимость в расчете по методу конфигурационного взаимодействия.

§ 5. Мультиплетная структура в твердых телах

До сих пор мы не принимали во внимание мультиплетную структуру, хотя и отметили, что в случае кристалла с $4f$ -электронами возникает задача о мультиплетной структуре, весьма сходная с той, с которой мы сталкиваемся при рассмотрении изолированных атомов. В значительной мере то же самое справедливо и для кристаллов с частично заполненными $3d$ - или $4d$ -оболочками атомов переходных элементов, хотя здесь взаимодействие с соседними атомами более существенно, чем для редкоземельных элементов. Однако этими примерами

мультиплетной структуры отнюдь не исчерпываются все встречающиеся ситуации. В рассмотренном выше случае молекулы H_6 обнаружен сложный набор мультиплетов, обусловленных взаимодействием спинов шести атомов кольца. Эти мультиплеты подробно рассмотрены в приложении 13 книги [1]. Суть дела здесь легко понять. Как мы видели, основному состоянию молекулы H_6 отвечает конфигурация, в которой шесть электронов занимают молекулярные орбиты с $m = 0, \pm 1$, причем каждая из них занята двумя электронами с противоположными направлениями спина. Это дает синглетное состояние. Однако, переведя один из электронов в состояние с $m = 2$, мы получим два электрона с неспаренными спинами, которые могут затем образовать синглетное или триплетное состояние. Аналогичная ситуация будет возникать всякий раз, когда электрон удаляется с дважды заполненного энергетического уровня и переводится на уровень, до этого пустой; мы постоянно будем сталкиваться с ней при исследовании возбужденных состояний в задаче об энергетических зонах.

Рассмотрение задач о мультиплетных мы отложим до следующего тома. Однако имеет смысл предварительно ознакомиться с методами, используемыми при их решении. Рассмотрим кристалл, содержащий редкоземельные ионы, сравнительно далеко удаленные друг от друга. Энергетические зоны, порождаемые атомными $4f$ -электронами, будут очень узки. Это сразу видно из расчета по методу сильно связанных электронов: поскольку перекрывание атомных функций различных редкоземельных ионов очень невелико, результирующее уширение уровней будет мало. Однако взаимодействие двух $4f$ -электронов, принадлежащих одному и тому же иону, будет значительным и приведет к образованию набора мультиплетов для каждого отдельного иона. Энергии уровней в этих мультиплетных будут расположены в интервале, большом по сравнению с шириной энергетической зоны. Тогда представляется очевидным, что в этом случае расчет должен исходить из рассмотрения в первую очередь энергетических уровней отдельного иона, после чего взаимодействие различных ионов следует учесть как малое возмущение. Этот порядок действий в корне отличен от процедуры построения энергетических зон уже на первом этапе расчета. Действительно, в последнем случае прежде всего учитывается взаимодействие между различными атомами, что приводит к образованию волновых функций типа молекулярных орбит, охватывающих весь объем кристалла, и лишь впоследствии принимается во внимание взаимодействие электронов в отдельном атоме.

Разумеется, мы вправе начать с расчета энергетических зон, желательно, однако, по возможности скорейшим путем получить

волновые функции, сконцентрированные на различных атомах. Другими словами, приняв за исходные зонные волновые функции, мы затем должны будем составлять из них линейные комбинации, чтобы прийти к функциям Ваннье. В случае редкоземельных ионов мы имеем дело с задачей, включающей ряд вырожденных $4f$ -состояний с различными значениями квантового числа m . При этом ситуация аналогична рассмотренной в книге [5] (гл. 7, § 5) для двумерного случая, когда мы имели два вырожденных p -состояния¹⁾. Как и в том случае, необходимо определить функции Ваннье так, чтобы каждая из них обладала симметрией одной из волновых функций изолированного атома, например симметрией состояния с заданным значением m . Тогда функции Ваннье окажутся весьма близкими к атомным, но они будут ортогонализированы. Они могут содержать вклады от соседних атомов. Так, в ряде интересующих нас задач ион редкоземельного элемента или элемента переходной группы окружен шестью ионами типа, скажем, кислорода; при этом функции Ваннье будут состоять главным образом из атомных функций переходного элемента, но с некоторым вкладом от атомных функций кислорода.

Построив эти функции Ваннье, мы можем затем перейти к исследованию мультиплетной структуры индивидуальных ионов, поступая в основном так же, как и в случае изолированного иона. Только после того, как это сделано и построены волновые функции, соответствующие данному состоянию отдельного иона, мы можем перейти к недиагональным матричным элементам гамильтониана, отвечающим двум различным волновым функциям возбужденных состояний системы. Одна из них будет описывать ситуацию, в которой все ионы, кроме одного, находятся в основных состояниях, а один — в возбужденном. Другая волновая функция будет отвечать ситуации того же типа с тем отличием, что возбужден другой атом. В общем случае недиагональные матричные элементы, отвечающие двум таким возбужденным состояниям, будут отличны от нуля, но очень малы. При их учете дискретный уровень, соответствующий возбуждению отдельного иона, расплывается в энергетическую зону, называемую экситонной. Можно показать, что пребыванию системы в одном из уровней такой зоны отвечает перенос энергии возбуждения: последняя медленно перемещается по кристаллу от одного атома к другому. Скорость переноса тем меньше, чем уже исходная энергетическая зона $4f$ -электронов.

В такой ситуации можно ожидать проявления дополнительных особенностей, приводящих к тому, что возбуждение будет

¹⁾ См. также [30]. — *Прим. ред.*

распространяться по кристаллу значительно медленнее, чем можно было бы ожидать. Электронная структура возбужденного иона будет несколько отличаться от структуры иона, находящегося в основном состоянии, и он, по-видимому, будет оказывать несколько иное действие на окружающие ионы. Поэтому при возбуждении одиночного иона на соседние ионы действовали бы силы, стремящиеся отодвинуть их или приблизить к возбужденному иону. Другими словами, их равновесные положения изменились бы. Двигаясь по кристаллу, это возбуждение должно «тащить» с собой сдвиг ядер, равно как и электронов. Это затормозит движение настолько, что возбуждение вполне может стабилизироваться практически на одном ионе.

Возникновение подобной ситуации еще более вероятно в тех случаях, когда вместо возбуждения иона мы имеем его ионизацию. Пусть электрон уходит с одного иона и размещается на другом, тогда мы получаем один ион с избыточным положительным зарядом и другой — с избыточным отрицательным. Чтобы развести эти противоположные заряды, требуется затратить кулоновскую энергию, и потому оба иона будут стремиться оставаться в соседних узлах. Присутствие зарядов приведет к значительному изменению сил, действующих на прочие соседние атомы, заставит их сдвинуться, что опять стабилизирует положения ионов, поскольку перемещение состояния ионизации с одного узла на другой потребует фактического передвижения ядер. Из рассмотрения подобных примеров мы приходим к понятию полярона — локализованной конфигурации ионов общего типа, подобного вышеописанному¹⁾.

Эти случаи, как и многие другие, иллюстрируют осложнения, возникающие при попытке детального описания мультиплетной структуры возбужденных состояний. Подобные ситуации появляются в магнитных задачах. Пусть мы имеем элемент переходной группы типа железа или кобальта, у которого в $3d$ -оболочке не достает нескольких электронов. Известно, что в изолированном ионе электронные спины стремятся расположиться так, чтобы обеспечить максимальную мультиплетность (правило Хунда). В этом случае энергетическое расстояние между различными мультиплетами того же порядка величины, что и ширина энергетических зон $3d$ -электронов. При этом, следовательно, не ясно, строить ли сначала функции Ваннье, решать задачу о мультиплетной структуре для индивидуальных ионов и затем учитывать взаимодействие между ними или действовать в обратном порядке, начиная с построения энергетических зон в одноэлектронной задаче и затем принимая во внимание их взаимодей-

¹⁾ См. [31]. — Прим. ред.

ствие. Задача о ферромагнетизме потому так и сложна, что приближенно одинаковы по величине два эффекта — перекрывание функций Ваннье, относящихся к различным узлам решетки (см. [5]), и взаимодействие между электронами на одном и том же атоме, дающее мультиплетную структуру.

Пояснительные примеры, приведенные выше, все относятся к задачам, которые войдут в следующий том этой серии. Они демонстрируют осложнения, возникающие при необходимости рассмотреть мультиплетную структуру, после решения задачи об одноэлектронных энергетических зонах. Одноэлектронный метод непосредственно применим в том единственном случае, когда мультиплетная структура несущественна. К счастью, так обстоит дело во многих важных задачах, как для металлов, так и для полупроводников. Условия применимости одноэлектронного подхода состоят прежде всего в том, чтобы энергетические зоны были широкими, т. е. должно иметь место сильное перекрывание функций Ваннье, отвечающих различным атомам. Далее, взаимодействие между электронами на одном и том же атоме не должно быть существенным. Так обстоит дело, например, в задаче о проводимости обычного полупроводника типа германия. Энергетические зоны здесь весьма широки — порядка нескольких электронвольт. Затем, если в кристалле имеются электрон и дырка или вакансия, то они быстро удалятся друг от друга, так что взаимодействие их на одном и том же атомном узле, ответственное за возникновение мультиплетной структуры, окажется несущественным. Именно в таких задачах можно безбоязненно использовать одноэлектронные методы.

Как мы видели в гл. 2, ширина энергетической зоны определяет величину скорости, с которой будет двигаться электрон в зоне: скорость пропорциональна производной от энергии по абсолютной величине вектора k , которая тем больше, чем шире зона. В тех случаях, к которым применим одноэлектронный метод, скорость электрона столь велика, что электрон успеет переместиться на много межатомных расстояний за то время, которое потребовалось бы ядрам, чтобы сместиться из своих равновесных положений; поэтому допустимо пренебречь связью с движением ядер, за исключением того, что она обуславливает рассеяние электронных волн. С другой стороны, в случае очень узких зон, возникающих, например, из $4f$ -уровней в кристалле с редкоземельными ионами, скорость электрона в чисто зонном состоянии была бы столь мала, что ядра успели бы сдвинуться, как было описано выше, и своими смещениями стабилизировать возбуждение на определенном ионе. Соответственно в этом случае описание ситуации в корне отличается от обычной картины энергетических зон. Возбуждение в таких условиях может

перемещаться с одного иона на другой, но это происходит в основном тогда, когда возбужденный и соседний с ним ионы в результате теплового возбуждения оказываются ближе друг к другу, чем обычно. При таком столкновении возбуждение может быть перенесено с одного иона на другой. Вероятность этого «теплового» переноса энергии определяется больцмановским фактором $\exp\{-(\text{энергия})/kT\}$. Входящая в него энергия активации равна высоте эффективного потенциального барьера, который необходимо преодолеть для перехода энергии возбуждения с одного иона на другой.

Из всего сказанного с очевидностью следует, что для решения многих задач метод энергетических зон не вполне приспособлен. Однако даже и в этих случаях расчет можно начать с отыскания энергетических зон. Затем, однако, необходимо вычислить функции Ванье для рассматриваемых узких зон, и в дальнейшем поступать с ними так же, как если бы они представляли собой атомные функции. Все задачи этих типов будут отложены до следующего тома. Они включают проблемы экситонов и поляронов, задачи о поле лигандов, магнитные задачи и многие другие. Некоторые авторы, особенно в советской литературе прежних лет, оказались в такой степени под впечатлением важности подобных проблем, что они несколько преуменьшили значение зонного подхода. Такая точка зрения не кажется нам правильной¹⁾. В физике полупроводников и металлов имеется немало важных задач, для которых метод энергетических зон, даже в самой простой его одноэлектронной форме, дает весьма близкое приближение к тому, что находят экспериментальным путем. Даже в других случаях, как мы упоминали, он составляет основу важного этапа расчета. Поэтому мы не приносим извинений за то, что уделили так много времени изложению одноэлектронной теории энергетических зон. Однако читатель должен помнить, что это есть лишь первое приближение и что существует чрезвычайно много важных задач, для которых оно не годится. В следующем параграфе мы укажем ряд более мощных методов, предложенных в последние годы в целях трактовки многоэлектронной проблемы. Подробное обсуждение этих методов будет отложено до следующего тома этой серии.

¹⁾ С точкой зрения автора, а также с его интерпретацией работ советских авторов трудно согласиться. Чтобы с уверенностью применять одноэлектронную зонную схему в какой бы то ни было задаче, ее нужно обосновать с более общих многоэлектронных позиций. Именно эта задача и была поставлена и решена в ряде советских и зарубежных работ (см., например, [3859, 3860, 1312, 4760, 2999] и др.). — *Прим. ред.*

§ 6. Различные формы многоэлектронной теории

Мы упоминали в гл. 5, § 3, что Бом и Пайнс в ряде работ [18–22]¹⁾, а затем ряд других авторов²⁾ выдвинули при рассмотрении многоэлектронной проблемы некоторые идеи, которые привели к поразительному прогрессу при описании корреляционных эффектов. Идея Бома и Пайнса состояла в том, чтобы ввести в теорию представление о плазменных колебаниях. В условиях, когда газ свободных электронов движется на фоне однородно распределенного положительного заряда такой плотности, что система в целом электрически нейтральна, можно задать вопрос о том, к чему приведет наложение на систему возмущения, скажем, синусоидальной волны. В гл. 5, § 2, чисто классическим способом было показано, что электрическое поле, появляющееся вследствие синусоидального возмущения плотности (подобного звуковой волне), вызывает появление возвращающей силы, пропорциональной возмущению плотности, и, следовательно, приводит к синусоидальным колебаниям заряда. Частота этих колебаний, плазменная частота, зависит от концентрации электронов. Если последняя так велика, как в металле, то частота лежит в ультрафиолетовой части спектра; для полупроводников, однако, она попадает в инфракрасную область. Бом и Пайнс предположили, что при квантовом рассмотрении эти колебания должны быть проквантованы, так что плазма может поглощать кванты, называемые ныне плазмонами, энергия которых равна произведению \hbar на плазменную частоту. Как отмечалось в гл. 5, § 2, ряд экспериментальных данных свидетельствует о том, что электроны, проходящие сквозь металл, действительно могут терять энергию, передавая ее плазмонам в неупругих процессах, и измерения энергетических потерь согласуются с вычисленным значением плазменной частоты.

Кажется разумным поэтому описывать движение электронов в терминах этих колебаний концентрации. Можно ввести волны концентрации с различными волновыми векторами; при этом энергия плазмонов как функция волнового вектора оказывается не строго постоянной, а зависит от k . Взяв набор таких волн со всеми значениями волнового вектора в зоне Бриллюэна, мы могли бы использовать амплитуды в качестве обобщенных координат, пригодных для описания положений электронов. При этом состояние электронного газа можно было бы описывать с помощью этих амплитуд, а не посредством обычных электронных координат. Оказывается, однако, более целесообразным

1) Другие работы этих авторов указаны в библиографии в конце книги.

2) См. список статей к гл. 11, § 7.

использовать в рассмотрении волны концентрации только с достаточно большими длинами, координаты электронов рассматривать обычным образом. Таким образом, координат для описания электронов у нас оказывается больше, чем требуется, и в теории уделяется значительное внимание этому очевидному затруднению¹⁾.

Мы указали, что плазменные частоты для металлов находятся в ультрафиолетовой области. Поэтому при обычных температурах плазмоны не возбуждены. В таких обстоятельствах, как показали Бом и Пайнс, поведение электронов изменится. Энергия взаимодействия между ними будет соответствовать не закону Кулона, а экранированному кулоновскому потенциалу типа $[\exp(-ar)]/r$, где a — постоянная, так что потенциал спадает экспоненциально на расстоянии, сравнимом с межатомным²⁾. В результате этого при расчете обменного взаимодействия оказывается, что сильная зависимость обменной энергии от k , которую мы отметили в § 3 как затруднение метода Хартри — Фока, почти исчезает. Трактовка Бомы и Пайнса дает, таким образом, приближенный учет корреляции, и результат состоит в том, что корреляционная поправка в основном компенсирует вклад, обусловленный зависимостью энергии от k .

В связи с проблемой корреляции были использованы и другие пути подхода. Некоторые из теоретиков-ядерщиков, особенно Бракнер и ряд других³⁾, развивали теорию строения ядра, в которой они исходили по существу из приближения Хартри — Фока, но затем последовательно доводили теорию до все более и более высоких этапов приближения, действуя в направлении, ведущем в принципе к методу учета корреляции. Было затрачено немало усилий с целью приспособить этот подход для нужд теории атомов и кристаллов. Это оказалось не просто, поскольку методы Бракнера непосредственно приспособлены для случая электронов на однородном фоне распределенного положительного заряда, что делает систему в целом электрически нейтральной. Были получены выражения для корреляционной энергии, содержащие тот же недостаток, что и результат Вигнера, упомянутый в предыдущей главе; неправильным оказывается поведение в пределе больших межъядерных расстояний, когда электроны на самом деле будут концентрироваться вокруг ядер.

¹⁾ Фактически выбор области волновых векторов, описывающих плазменные волны, оказывается не произвольным: при больших k эти волны сильно затухают [1299, 3929]. — *Прим. ред.*

²⁾ Явный вид потенциала в теории Бомы и Пайнса оказывается несколько иным, что, однако, не меняет последующих рассуждений. — *Прим. ред.*

³⁾ См. в библиографии в конце книги работы [1415—1424, 1913, 1914, 2240, 2241, 2312, 2313, 2621, 2622, 3241, 3494, 3717, 4124, 4216, 4217, 4650, 4718—4722].

Не ясно, однако, заключена ли эта трудность в самих основах метода Бракнера и др. Келли [23–26] недавно развил метод в форме, пригодной для изолированного атома, и применил его для расчета корреляционной энергии атома бериллия. С помощью численного интегрирования ему удалось получить результаты с той же точностью, какую дают для этого атома метод конфигурационного взаимодействия или другие методы. Таким образом, не исключено, что на этом пути можно получить схему учета корреляционной энергии, которая дополнит существующие методы трактовки атомов, молекул и кристаллов и может привести со временем к достаточно точным результатам для полной энергии этих систем.

Подход несколько другого типа использовали Рот и Пратт [27] и Кон и Латинджер [28] при рассмотрении задачи о диэлектрических свойствах кристалла. Они использовали методы, сходные с применяемыми в физике высоких энергий и теории поля. Этот подход приводит к явлению перенормировки, которое можно интерпретировать в терминах диэлектрической проницаемости кристалла. Некоторая форма этой теории, несомненно, будет необходимой для адекватного описания диэлектрических эффектов¹⁾.

Все эти теоретико-полевые методы Бракнера и других принимают в качестве исходных невозмущенные волновые функции электронов и в дальнейшем переходят к исследованию возмущенных решений все более высокого порядка. Вместо того чтобы вдаваться в осложнения обычной теории возмущений, когда после первого и второго порядков оказывается столь много типов членов ряда теории возмущений, что их трудно рассматривать, названные авторы используют методы, основанные на технике диаграмм Фейнмана или Голдстоуна, разработанной в теории поля для суммирования ряда теории возмущений во всех порядках. В основе этих методов лежат мощные теоремы, доказанные сравнительно недавно в теории возмущений бесконечно высокого порядка. Мы отмечаем, что в случае метода Бракнера, когда электроны предполагаются находящимися в свободном от полей пространстве, невозмущенные функции, по которым проводится разложение, представляют собой плоские волны. Мы знаем по своему опыту, что в задачах физики твердого тела разложение по плоским волнам не практично. Однако более поздние исследования принимают в качестве исходных базисных функций решения задачи с периодическим потенциалом. Это позволяет нам надеяться, что в конечном счете окажется возможным провести одноэлектронное рассмотрение того

¹⁾ Подробное изложение методов теории поля в применении к многоэлектронной задаче можно найти в монографиях [32–34]. — *Прим. ред.*

же типа, что и в настоящем томе, и затем применять волновые функции этой задачи в качестве базисных функций для расчета по теории возмущений. Последний при использовании методов, рассмотрение которых будет проведено в следующем томе, обеспечивает требуемую точность для адекватного решения многоэлектронной проблемы.

§ 7. Библиография по многоэлектронной теории

Имеется обширный список статей по теории твердого тела, в которых делается упор на многоэлектронные аспекты. Некоторые из этих работ исходят из точки зрения Бома и Пайнса и из результатов теории плазменных колебаний; другие базируются на подходе Бракнера, основанном на теории поля. Кроме того, некоторые работы возникли на основе диэлектрического подхода в теории многих тел или на основе исследования корреляционных методов. В конце главы указаны работы из библиографии в конце этого тома, относящиеся к указанным задачам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Slater J. C., *Quantum Theory of Molecules and Solids*, vol. 1, New York, 1963. (См. перевод: Дж. Слэтер, *Электронная структура молекул*, изд-во «Мир», 1965).
2. Hurley A. C., Lennard-Jones J. E., Pople J. A., *Proc. Roy. Soc.*, **A220**, 446 (1953).
3. Schmid L. A., *Phys. Rev.*, **92**, 1373 (1953).
4. Coulson C. A., Redei L. B., Stocker D., *Proc. Roy. Soc.*, **A270**, 357, 373, 383, 397 (1962).
5. Slater J. C., *Quantum Theory of Atomic Structure*, vol. 2, New York, 1960.
6. Raimes S., *Rep. Progr. Phys.*, **20**, 1 (1957).
7. Herman F., Skillman S., *Atomic Structure Calculations*, Englewood Cliffs, N. J., 1963.
8. Liberman D., Waber J. T., Cromer D. T., *Phys. Rev.*, **137**, A27 (1965).
9. Prokofjew W., *Zs. Phys.*, **58**, 255 (1929).
10. Douglas A. S., *Proc. Cambr. Phil. Soc.*, **52**, 687 (1956).
11. Slater J. C., *Phys. Rev.*, **91**, 528 (1953).
12. Slater J. C., *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S.*, **13**, 423 (1927).
13. Wigner E., Seitz F., *Phys. Rev.*, **46**, 509 (1934).
14. Wigner E., *Phys. Rev.*, **46**, 1002 (1934).
15. Löwdin P. O., *Phys. Rev.*, **97**, 1474, 1490, 1509 (1955).
16. Löwdin P. O., *Svensk Kem. Tidskr.*, **67**, 369, 370 (1955).
17. Löwdin P. O., Shull H., *Phys. Rev.*, **101**, 1730 (1956).
18. Bohm D., Pines D., *Phys. Rev.*, **80**, 903 (1950); **82**, 625 (1951).
19. Bohm D., *Phys. Rev.*, **84**, 836 (1951).
20. Pines D., Bohm D., *Phys. Rev.*, **85**, 338 (1952).
21. Bohm D., Pines D., *Phys. Rev.*, **92**, 609 (1953).
22. Pines D., *Phys. Rev.*, **92**, 626 (1953).
23. Kelly H. P., *Phys. Rev.*, **131**, 684 (1963).
24. Kelly H. P., Sessler A. M., *Phys. Rev.*, **132**, 2091 (1963).
25. Kelly H. P., *Phys. Rev.*, **134**, A1450 (1964).

26. Kelly H. P., Phys. Rev., **136**, B896 (1964).
27. Roth L. M., Pratt G. W., Jr., Phys. Chem. Solids, **8**, 47, 50 (1959).
28. Kohn W., Luttinger J. M., Phys. Rev., **118**, 41 (1960).
- 29*. Харрисон У., Псевдопотенциалы в теории металлов, изд-во «Мир», 1968.
- 30*. Джонс Г., Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах, изд-во «Мир», 1968.
- 31*. Пекар С. И., Исследования по электронной теории ионных кристаллов, М.—Л., 1951.
- 32*. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В., Метод функций Грина в статистической механике, М., 1961.
- 33*. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, М., 1962.
- 34*. Киржниц Д. А., Полевые методы теории многих частиц, М., 1963.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Многочастичная теория: [4, 177, 307, 431—436, 535, 897, 898, 905, 909, 914, 915, 920, 925, 939, 965, 971—973, 976—979, 1010, 1011, 1084, 1122, 1137, 1181, 1207, 1219, 1261, 1279—1285, 1297—1314, 1396—1400, 1402, 1403, 1414, 1415—1424, 1484, 1507, 1511, 1512, 1514, 1572, 1602—1604, 1608, 1652, 1686, 1687, 1744, 1865, 1873, 1913, 1914, 1917—1919, 1930, 1963, 1969, 1970, 1972, 1973, 1997, 2000, 2001, 2005, 2033, 2036—2041, 2063, 2067, 2072, 2112, 2145, 2163, 2185—2187, 2223, 2224, 2240, 2241, 2269, 2275, 2281, 2302, 2303, 2312, 2313, 2320, 2321, 2326, 2328, 2377, 2380, 2403, 2434, 2451, 2488, 2516, 2574, 2580, 2614—2620, 2621, 2622, 2646—2648, 2699, 2720, 2739, 2744, 2769—2776, 2778, 2780, 2782, 2810, 2847—2850, 2856, 2857, 2899, 2900, 2920, 2921, 2948, 2977, 2992, 2999—3001, 3004, 3005, 3101, 3116, 3132, 3146, 3152—3154, 3164, 3165, 3227, 3228, 3236, 3237, 3241, 3270, 3307, 3310, 3356, 3382—3384, 3437—3439, 3441, 3442, 3474, 3493, 3494, 3495, 3522, 3717, 3740, 3741, 3749—3751, 3753—3756, 3789, 3794, 3828, 3926, 3935, 3859, 3900, 3907, 3908, 3926—3935, 3958, 3959, 3982, 3991, 3992, 4021, 4024—4027, 4035, 4081, 4097, 4098, 4120, 4124, 4159, 4209, 4214, 4215, 4216, 4217, 4236, 4313, 4314 4317, 4320, 4325—4327, 4335—4340, 4346, 4354, 4355, 4357, 4360—4362, 4391, 4399, 4457, 4473—4476, 4487, 4511, 4531, 4548, 4549, 4552, 4564—4569, 4587, 4623—4625, 4650, 4663, 4678, 4679, 4695, 4700, 4709, 4711, 4718, 4719, 4721, 4722, 4756, 4760—4763, 4807, 4852—4856, 4860, 4906, 4911—4913].

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. ДВИЖЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ

§ 1. Средняя скорость волнового пакета

Пусть имеется одиночный электрон, движущийся в периодическом поле и, следовательно, описываемый уравнением Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{V}\right)u = Eu; \quad (\text{П}1.1)$$

здесь V — периодический потенциал, удовлетворяющий условию

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = V(\mathbf{r}), \quad (\text{П}1.2)$$

\mathbf{R}_l — один из векторов решетки. Как известно, существуют решения уравнения (П1.1), имеющие вид произведений плоской волны на периодическую функцию¹⁾ (см. [1]). Запишем их для n -й энергетической зоны в виде

$$u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \cdot \omega_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (\text{П}1.3)$$

Функция $\omega_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ удовлетворяет условию типа (П1.2), т. е. она представляет собой периодическую функцию, повторно принимающую свои значения в каждой элементарной ячейке. Будем считать, что функции (П1.3) с приведенным волновым вектором \mathbf{k} отвечает энергия $E_n(\mathbf{k})$, соответствующая n -й зоне. Найдем теперь среднее значение оператора скорости в состоянии, описываемом рассматриваемой волновой функцией, и покажем, что оно определяется выражением

$$[v_n(\mathbf{k})]_{\text{ср}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}), \quad (\text{П}1.4)$$

где оператор $\nabla_{\mathbf{k}}$ означает дифференцирование по переменным k_x, k_y, k_z .

Чтобы доказать это, воспользуемся методом Джонса и Зинера [2, 3], который ведет к цели прямым и достаточно общим путем. Подставляя волновую функцию (П1.3) в уравнение

¹⁾ См., например, [7] или любую другую книгу по электронной теории твердого тела. — *Прим. ред.*

Шредингера (П1.1), видим, что функция $w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ должна удовлетворять уравнению

$$\nabla^2 w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - V \right] w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0. \quad (\text{П1.5})$$

Отсюда получаем

$$\int u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) dv = i\mathbf{k} + \int w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) dv, \quad (\text{П1.6})$$

где интегрирование проводится по тому объему, в котором нормирована волновая функция. Подействуем теперь на уравнение (П1.5) оператором ∇_k , включающим дифференцирование по k_x , k_y и k_z , так что производные берутся от $w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, $E_n(\mathbf{k})$, \mathbf{k} и \mathbf{k}^2 . Помножив результат на $w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, получим

$$\begin{aligned} w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \left\{ \nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - V \right] \right\} \nabla_k w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \\ + 2i w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \\ + \left[\frac{2m}{\hbar^2} \nabla_k E_n(\mathbf{k}) - 2\mathbf{k} \right] w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0. \quad (\text{П1.7}) \end{aligned}$$

Не следует смешивать операторы ∇ и ∇_k , обозначающие соответственно дифференцирование по переменным x, y, z и k_x, k_y, k_z . Проинтегрируем теперь уравнение (П1.7) по объему.

Интеграл от выражения, стоящего в первой строке в (П1.7), поскольку оно содержит эрмитов оператор, можно переписать в виде

$$\int \nabla_k w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \left\{ \nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - V \right] \right\}^* w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) dv. \quad (\text{П1.8})$$

Подынтегральное выражение в качестве множителя содержит величину, комплексно сопряженную выражению в левой части уравнения (П1.5), равному нулю. Следовательно, интеграл (П1.8) обращается в нуль. Поэтому из (П1.7) имеем

$$\int w_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla w_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) dv = \frac{im}{\hbar^2} \nabla_k E_n(\mathbf{k}) - i\mathbf{k}, \quad (\text{П1.9})$$

или, используя уравнение (П1.6),

$$\int u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) dv = \frac{im}{\hbar^2} \nabla_k E_n(\mathbf{k}). \quad (\text{П1.10})$$

Левую сторону этого соотношения проинтегрируем по частям или же воспользуемся тем обстоятельством, что оператор $i \nabla$ эр-

митов, тогда выражение (П1.10) принимает вид

$$\frac{i\hbar}{2m} \int [\nabla u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \nabla u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})] d\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_n(\mathbf{k}). \quad (\text{П1.11})$$

Выражение в левой части (П1.11) представляет собой среднюю скорость (см., например, [4]). Таким образом, мы, как и намеревались, доказали формулу (П1.4). Доказательство в приведенной форме справедливо лишь в отсутствие магнитного поля, поскольку здесь не включены члены, содержащие векторный потенциал, ни в уравнение Шредингера, ни в оператор скорости.

Мы нашли величину средней скорости электрона в состоянии, описываемом блоховской волной (П1.3). Можно, однако, сложить много блоховских волн, отвечающих близким значениям вектора \mathbf{k} и одной и той же энергетической зоне, построив тем самым волновой пакет. Среднюю скорость последнего можно найти как взятое с определенным весом среднее значение скоростей, отвечающих содержащимся в нем блоховским функциям. Действительно, легко доказать, что не существует отличных от нуля недиагональных матричных элементов оператора скорости, связывающих волны с различными значениями вектора \mathbf{k} . Поскольку все блоховские волны в пакете имеют примерно одинаковую скорость, такое же значение получится и для волнового пакета. Таким образом, это дает величину, определяемую формулой (П1.4), в качестве средней скорости волнового пакета, составленного из блоховских волн, все волновые векторы которых близки к значению \mathbf{k} .

§ 2. Ускорение волнового пакета во внешнем поле

В предыдущем параграфе мы нашли скорость волнового пакета в периодическом поле в отсутствие внешних электрического или магнитного полей. Эта ситуация отвечает стационарному состоянию с постоянной энергией, постоянным волновым вектором и постоянной скоростью, как для свободно движущейся частицы в классической механике. Поставим теперь вопрос о влиянии приложенного извне поля, как электрического, так и магнитного. Будем считать поле слабым, так что его можно рассматривать как возмущение, и будем учитывать действие магнитного поля упрощенным образом, приводящим к правильным результатам для эффектов первого порядка, хотя этот способ нельзя обосновать в более высоких приближениях. Корректное рассмотрение влияния магнитного поля включает так называемое преобразование калибровки — характерную особенность

теории векторного потенциала и уравнения Шредингера, которую мы не будем подробно обсуждать в настоящем томе. Упрощенный метод, используемый нами, основан на идеях, которые впервые выдвинул Ваннье.

Для наших целей удобно разложить волновую функцию, представив ее в виде линейной комбинации функций Ваннье, принадлежащих только одной зоне. Напомним (см. [1]), что решение уравнения Шредингера в форме одиночной волны с определенным волновым вектором можно записать как блоховскую сумму по функциям Ваннье

$$u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_j} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (\text{П1.12})$$

Задача состоит в том, чтобы составить линейную комбинацию нескольких функций $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ с близкими значениями \mathbf{k} , которая будет в достаточной степени сконцентрирована в пространстве. Как указано в основном тексте книги, эта локализация не может быть очень сильной, без размытия пакета на слишком обширную область в \mathbf{k} -пространстве. Далее, линейную комбинацию функций типа (П1.12) можно представить как линейную комбинацию функций Ваннье

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (\text{П1.13})$$

Здесь мы использовали зависящие от времени волновые функции, поскольку нас интересует движение волнового пакета. Амплитудная функция $\Psi(\mathbf{R}_j, t)$ будет вести себя как $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \exp[-iE_n(\mathbf{k})t/\hbar]$, т. е. как плоская волна с волновым вектором \mathbf{k} и энергией $E_n(\mathbf{k})$ в пределах области локализации волнового пакета, но будет быстро спадать за его пределами. Иными словами, зависящая от пространственных координат часть будет иметь вид произведения величин $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j)$ на модулирующую функцию, заметно отличную от нуля только внутри волнового пакета. Поскольку предполагается, что пакет захватывает много атомных узлов, значение \mathbf{k} будет довольно хорошо определено, и, следовательно, в качестве $E_n(\mathbf{k})$ можно выбрать энергию, отвечающую среднему значению \mathbf{k} .

Подставим теперь волновую функцию (П1.13) в возмущенное уравнение Шредингера, включающее не только оператор Гамильтона $(H_0)_{\text{оп}}$, стоящий в уравнении (П1.1) и характеризующий задачу с периодическим потенциалом, но также и возмущающий член $(H_1)_{\text{оп}}$. Последний мы явно выпишем несколько ниже; он будет содержать члены, обусловленные внешними элект-

трическим и магнитным полями, действующими на волновой пакет. При этом уравнение Шредингера

$$(H_0 + H_1)_{\text{оп}} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

приобретает следующий вид:

$$\sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) (H_0 + H_1)_{\text{оп}} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = i\hbar \sum_{\mathbf{R}_j} \frac{\partial \Psi(\mathbf{R}_j, t)}{\partial t} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (\text{П}1.14)$$

Умножим его слева на функцию, комплексно сопряженную одной из функций Ваннье, относящейся к n -й зоне, которые мы использовали для построения волнового пакета, а именно на $a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, и проинтегрируем по объему. Получим

$$\sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (H_0 + H_1)_{\text{оп}} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dv = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{R}_i, t)}{\partial t}. \quad (\text{П}1.15)$$

Мы здесь воспользовались в правой части свойством ортогональности функций a_n . Теперь нужно рассмотреть интегралы в левой части. Начнем с члена, содержащего $(H_0)_{\text{оп}}$.

Известно¹⁾ (см. [1]), что

$$\int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (H_0)_{\text{оп}} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dv = \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j), \quad (\text{П}1.16)$$

где $\mathcal{E}_n(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ — одна из фурье-компонент разложения энергии $E_n(\mathbf{k})$ в n -й зоне как функции \mathbf{k} . Это разложение имеет вид

$$E_n(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}_s} \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_s) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_s). \quad (\text{П}1.17)$$

Используем теперь остроумный метод, предложенный Ваннье, чтобы переписать сумму $\sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) \int a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (H_0)_{\text{оп}} a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dv$ в иной, более интересной форме.

Идея, на которой основан этот метод, состоит в следующем. Нужно использовать соотношение (П1.17), правая часть которого выражена как функция \mathbf{k} , переписать его как функцию квазиимпульса \mathbf{p} , равного $\hbar\mathbf{k}$, и затем заменить переменную \mathbf{p} оператором $-i\hbar\nabla$, что сводится к замене вектора \mathbf{k} оператором $-i\nabla$. Затем необходимо исследовать действие полученного

¹⁾ См., например, [8]. — Прим. ред.

оператора на произвольную функцию. Таким образом, нас интересует, как действует оператор $\exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla)$ на произвольную функцию. Проще обсудить одномерный случай, когда рассматриваемый оператор имеет вид $\exp(-X_s \partial/\partial x)$; обобщение на случай трех измерений совершается без труда. Разлагая экспоненту в степенной ряд, получаем

$$\exp\left(-X_s \frac{\partial}{\partial x}\right) f(x) = \left(1 - X_s \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2!} X_s^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \dots\right) f(x) = f(x - X_s). \quad (\text{П1.18})$$

Используя степенной ряд по трем переменным и трехмерную форму теоремы Тэйлора, докажем аналогичным образом, что

$$\exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla) f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} - \mathbf{R}_s). \quad (\text{П1.19})$$

Составим теперь по указанному выше рецепту оператор $[E_n(\mathbf{k})]_{\text{оп}}$ и подействуем им на функцию $\Psi(\mathbf{R}_i, t)$. Получим

$$\begin{aligned} [E_n(\mathbf{k})]_{\text{оп}} \Psi(\mathbf{R}_i, t) &= \sum_{\mathbf{R}_s} \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_s) \exp(-\mathbf{R}_s \cdot \nabla) \Psi(\mathbf{R}_i, t) = \\ &= \sum_{\mathbf{R}_s} \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_s) \Psi(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_s, t) = \sum_{\mathbf{R}_j} \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \Psi(\mathbf{R}_j, t) = \\ &= \sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (H_0)_{\text{оп}} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{v}, \quad (\text{П1.20}) \end{aligned}$$

где мы заменили при суммировании \mathbf{R}_s на $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. Видно, кстати, что в отсутствие возмущения ($H_1 = 0$) можно было бы переписать уравнение (П1.15) в форме

$$[E_n(\mathbf{k})]_{\text{оп}} \Psi(\mathbf{R}_i, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{R}_i, t)}{\partial t}. \quad (\text{П1.21})$$

Это равенство похоже на уравнение Шредингера для волновой функции $\Psi(\mathbf{R}_i, t)$, причем последняя считается непрерывной функцией величины \mathbf{R}_i , рассматриваемой как переменная, а оператор $[E_n(\mathbf{k})]_{\text{оп}}$ следует рассматривать как гамильтониан.

Как было отмечено автором работы [5], выражение (П1.21) представляет собой уравнение Шредингера, связанное с классическим гамильтонианом

$$E_n\left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar}\right) = \sum_{\mathbf{R}_s} \mathcal{E}_n(\mathbf{R}_s) \exp\left(-\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_s}{\hbar}\right), \quad (\text{П1.22})$$

Последний получается, если выразить волновой вектор \mathbf{k} через квазиимпульс \mathbf{p} и записать энергию в n -й энергетической зоне как функцию квазиимпульса. Мы знаем, однако, что центр тяжести волнового пакета движется согласно классическим гамильтоновым уравнениям движения ¹⁾. В невозмущенном случае мы можем поэтому использовать уравнение Гамильтона $d\mathbf{q}/dt = = \partial H / \partial \mathbf{p}$, чтобы найти компоненты скорости волнового пакета. Имеем

$$v_x = \frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial k_x}. \quad (\text{П1.23})$$

Это есть x -компонента уравнения (П1.4). Другими словами, пользуясь классическим гамильтонианом (П1.22), мы получаем очень простое доказательство теоремы о скорости волнового пакета, приведенной в § 1 данного приложения.

Рассмотрим теперь возмущающий член в уравнении (П1.14). Он будет приводить к изменению со временем среднего импульса или среднего волнового вектора волнового пакета, как можно заметить, применяя к той же задаче другое уравнение Гамильтона; x -компонента последнего уравнения имеет вид $dp_x/dt = = -\partial H / \partial x$. Невозмущенный гамильтониан, согласно формуле (П1.22), не зависит от пространственных координат, в результате чего вектор \mathbf{p} (или \mathbf{k}) не зависит от времени. Однако, если в гамильтониане появляется добавочный член H_1 , который может зависеть от координат, это может, следовательно, привести к изменению волнового вектора во времени.

В простейшем случае оператор H_1 зависит только от координат (это исключает магнитные эффекты, которым отвечает зависимость гамильтониана возмущения от импульса или от скорости) и, кроме того, столь медленно изменяется в пространстве, что его можно считать постоянным на протяжении волнового пакета. Так будет обстоять дело, когда член H_1 обусловлен внешним электрическим полем, меняющимся лишь на макроскопических расстояниях, больших по сравнению с размерами волнового пакета. С другой стороны, последние представляют собой величины микроскопического порядка, хотя они и велики по сравнению с межатомными расстояниями. В таких условиях в интеграле $\int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) (H_1)_{\text{оп}} a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dv$ можно вынести приблизительно постоянную величину $(H_1)_{\text{оп}}$ из-под знака интеграла. Ввиду ортогональности функций Ванье интеграл не будет обращаться в нуль только при $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_j$, а при выполнении этого равенства интеграл оказывается равным произведению единицы на $H_1(\mathbf{R}_i)$ — значение возмущающего потенциала на

¹⁾ См., например, [4], приложение 3.

атомном узле \mathbf{R}_i . В этом случае уравнение (П1.15) с учетом (П1.22) можно переписать в виде

$$[E_n(-i\nabla) + H_1(\mathbf{R}_i)] \Psi(\mathbf{R}_i, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{R}_i, t)}{\partial t}. \quad (\text{П1.24})$$

Здесь оператор $E_n(-i\nabla)$ представляет собой энергию в n -й зоне, выраженную как функция \mathbf{k} , где вектор \mathbf{k} в свою очередь заменен оператором $-i\nabla$. Итак, мы имеем уравнение Шредингера, полученное из классического гамильтониана $E_n(\mathbf{k}) + H_1(\mathbf{R}_i)$, в котором потенциал возмущения H_1 рассматривается как функция непрерывной переменной \mathbf{R}_i (или непрерывной переменной \mathbf{R} , которая впоследствии будет принимать дискретные значения \mathbf{R}_i).

Воспользуемся теперь теоремой о том, что центр тяжести волнового пакета удовлетворяет классическим уравнениям движения Гамильтона. Это дает

$$\frac{dp_x}{dt} = \hbar \frac{dk_x}{dt} = -\frac{\partial H_1}{\partial x}. \quad (\text{П1.25})$$

Здесь H_1 есть функция непрерывных переменных x , y и z , определяющих положение центра тяжести волнового пакета. Другими словами, видно, что в присутствии возмущения квазиимпульс, соответствующий волновому вектору пакета, будет вести себя согласно второму закону Ньютона, причем скорость изменения квазиимпульса равна возмущающей силе, x -компонента которой есть $-\partial H_1/\partial x$. Конечно, как указывалось выше, это не означает, что волновой пакет будет двигаться, подобно классической частице в поле возмущения H_1 , ввиду неклассической связи между квазиимпульсом и скоростью, описываемой формулой (П1.4). Следствия этого факта рассмотрены в гл. 2.

Если энергию E_n можно разложить в степенной ряд вблизи энергетического минимума и нас интересуют уровни энергии, близкие к этому минимуму, то можно взять разложение типа (2.11) плюс члены высшего порядка, которыми можно пренебречь. В таком случае уравнение (П1.24) сводится к следующему:

$$\left[E_0 - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + H_1(\mathbf{R}) \right] \Psi(\mathbf{R}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{R}, t)}{\partial t}. \quad (\text{П1.26})$$

Это обычное уравнение Шредингера для частицы с тензорной эффективной массой при наличии потенциала H_1 . Такое приближение используется в задаче о водородоподобной волновой функции электрона вблизи примеси, как упоминалось в гл. 2, § 5.

Теперь можно обсудить вопрос о том, как обобщить наше

рассмотрение на случай магнитного поля. Аналогично случаю электрических полей, будем считать, что магнитное поле имеет макроскопический характер, т. е. изменяется только на макроскопических расстояниях, оставаясь практически постоянным на протяжении волнового пакета. Прежде всего напомним, как входит магнитное поле в гамильтониан и в уравнения Шредингера (см. [4], приложение 4). Известно, что для учета наличия магнитного поля нужно заменить обычный член кинетической энергии в гамильтониане $p^2/2m$ выражением $(p - eA)^2/2m$, где A — векторный потенциал, $-e$ — заряд электрона (так что e представляет собой положительную величину). Покажем теперь, что соответствующее видоизменение уравнения (П1.24), описывающего движение волнового пакета, состоит в замене $E_n(-iV)$ на $E_n(-iV + eA/\hbar)$, как этого естественно было ожидать, поскольку в классической механике мы заменяем p на $p + eA$.

Основной эффект, к которому приводит магнитное поле в уравнении Шредингера, состоит, как мы только что заметили, в изменении члена кинетической энергии. Раскроем выражение $(-i\hbar\nabla + eA)^2/2m$ и примем, что потенциальная энергия V входит так же, как в уравнение (П1.1); тогда вместо последнего уравнения получим (переходя одновременно к уравнению Шредингера со временем)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{ie\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla}{m} + \frac{e^2\mathbf{A}^2}{2m} + V \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (\text{П1.27})$$

Таким образом магнитное поле приводит к появлению в гамильтониане двух дополнительных $-ie\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla/m + e^2\mathbf{A}^2/2m$. При рассмотрении их следует помнить, что векторный потенциал A , подобно скалярному потенциалу, определен неоднозначно. Добавив к A произвольный вектор с равным нулю ротором, мы оставим магнитное поле неизменным, поскольку $\mathbf{B} = \text{rot } A$. Если этот вектор, включенный в A , не зависит от времени, то он не дает вклада и в электрическое поле (поскольку составляющая напряженности электрического поля, происходящая от A , определяется выражением $\mathbf{E} = -\partial A/\partial t$). Если эта добавка зависит от времени, можно добавить компенсирующую поправку к скалярному потенциалу, с тем чтобы сохранить напряженность электрического поля неизменной. Именно эта возможность преобразования векторного и скалярного потенциалов без изменения поля приводит к существованию преобразования калибровки — процедуры, сводящейся просто к описанному только что изменению потенциалов.

В частности, можно выбрать калибровку так, чтобы сразу обратить в нуль векторный потенциал в центре волнового пакета; этот метод был использован Джонсом и Зинером в работе,

цитированной выше. В таком случае для волнового пакета небольших размеров член с $e^2A^2/2m$ становится очень малым и в рассматриваемой задаче им можно пренебречь (однако он должен быть сохранен в некоторых других задачах, например в теории диамагнетизма). Член первого порядка, содержащий $\mathbf{A} \cdot \mathbf{V}$, однако, таким способом устранить нельзя, поскольку, как мы увидим ниже, он приводит к появлению слагаемых, содержащих производные от компонент \mathbf{A} по переменным x , y и z , т. е. членов, в которые входит магнитное поле.

Мы имеем, следовательно, просто член возмущения $-ie\hbar\mathbf{A} \cdot \mathbf{V}/m$ в гамильтониане. Проверим теперь в принятом приближении сделанное выше утверждение о том, что модификацию уравнения (П1.24) можно осуществить посредством замены $E_n(-i\mathbf{V})$ на $E_n(-i\mathbf{V} + e\mathbf{A}/\hbar)$. Ввиду обращения в нуль векторного потенциала в центре волнового пакета это выражение можно разложить по степеням векторного потенциала, сохранив только линейный член. Иными словами, можно написать

$$E_n\left(-i\mathbf{V} + \frac{e\mathbf{A}}{\hbar}\right) = E_n(-i\mathbf{V}) + \frac{\partial E_n}{\partial k_x} \frac{eA_x}{\hbar} + \frac{\partial E_n}{\partial k_y} \frac{eA_y}{\hbar} + \frac{\partial E_n}{\partial k_z} \frac{eA_z}{\hbar}. \quad (\text{П1.28})$$

Первое слагаемое в правой части (П1.28) есть просто невозмущенный оператор Гамильтона из уравнения (П1.21). Покажем теперь, что остальные члены, действуя на функцию $\Psi(\mathbf{R}_i, t)$, как в уравнении (П1.24), дают при подстановке в уравнение (П1.15) то же, что и член возмущения $-ie\hbar\mathbf{A} \cdot \mathbf{V}/m$ в гамильтониане (П1.27). Иначе говоря, покажем, что

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial E_n}{\partial k_x} \frac{eA_x}{\hbar} + \frac{\partial E_n}{\partial k_y} \frac{eA_y}{\hbar} + \frac{\partial E_n}{\partial k_z} \frac{eA_z}{\hbar} \right) \Psi(\mathbf{R}_i, t) = \\ & = \sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left(-\frac{ie\hbar\mathbf{A} \cdot \mathbf{V}}{m} \right) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dv. \quad (\text{П1.29}) \end{aligned}$$

Согласно формуле (П1.4), выражение $(\partial E_n/\partial k_x)/\hbar$ равно x -компоненте скорости \mathbf{v}_n волнового пакета, образованного из волновых функций n -й энергетической зоны. Поэтому выражение в левой части уравнения (П1.29) равно

$$(e\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}_n) \Psi(\mathbf{R}_i, t). \quad (\text{П1.30})$$

Мы должны теперь показать, что то же значение имеет и правая часть выражения (П1.29). Для этой цели используем функции Блоха в виде (П1.12). Вычисляя для них среднюю скорость,

согласно (Пл.10), имеем

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{v}_n(\mathbf{k})]_{\text{ср}} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) = \int u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \left(-\frac{i\hbar\nabla}{m} \right) u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d\mathbf{v} = \\
 &= N^{-1} \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} \int \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)] a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left(-\frac{i\hbar\nabla}{m} \right) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{v} = \\
 &= \sum_{\mathbf{R}_s} \int \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_s) a_n^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{i\hbar\nabla}{m} \right) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_s) d\mathbf{v}. \quad (\text{Пл.31})
 \end{aligned}$$

Мы заменили здесь $\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$ на \mathbf{R}_s и просуммировали по одному из двух индексов, \mathbf{R}_i или \mathbf{R}_j , что дало N одинаковых слагаемых.

Рассмотрим далее правую часть уравнения (Пл.29). Как известно, внутри волнового пакета волновая функция представляет собой суперпозицию ряда блоховских волн с почти одинаковым волновым вектором. Поэтому функция $\Psi(\mathbf{R}_j, t)$ ведет себя подобно плоской волне $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j)$, умноженной на функцию, не зависящую от \mathbf{R}_j в пределах пакета и быстро спадающую вне его. Следовательно, величину $\Psi(\mathbf{R}_j, t)$ можно приближенно переписать в виде

$$\Psi(\mathbf{R}_j, t) = \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)] \Psi(\mathbf{R}_i, t). \quad (\text{Пл.32})$$

Таким образом, используя (Пл.31), получаем

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{R}_j} \Psi(\mathbf{R}_j, t) \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left(-\frac{i\hbar\nabla}{m} \right) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{v} = \\
 = \sum_{\mathbf{R}_j} \int \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)] a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left(-\frac{i\hbar\nabla}{m} \right) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{v} \Psi(\mathbf{R}_i, t) = \\
 = [\mathbf{v}_n(\mathbf{k})]_{\text{ср}} \Psi(\mathbf{R}_i, t). \quad (\text{Пл.33})
 \end{aligned}$$

Взяв теперь скалярное произведение полученной величины на $e\mathbf{A}$ и сравнив это с (Пл.29), придем к доказательству рассматриваемой теоремы.

Пусть, далее, имеется возмущение, включающее как потенциальную энергию V_1 , соответствующую электрическому полю [величина H_1 в уравнении (Пл.24)], так и векторный потенциал \mathbf{A} . Тогда, очевидно, уравнение Шредингера для функции $\Psi(\mathbf{R}_j, t)$ можно написать в виде

$$\left[E_n \left(-i\nabla + \frac{e\mathbf{A}}{\hbar} \right) + V_1(\mathbf{R}_i) \right] \Psi(\mathbf{R}_i, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{R}_i, t)}{\partial t}; \quad (\text{Пл.34})$$

это совпадает с уравнением Шредингера с гамильтонианом

$$H = E_n \left(\frac{\mathbf{p} + e\mathbf{A}}{\hbar} \right) + V_1. \quad (\text{Пл.35})$$

Волновой пакет, следовательно, будет двигаться согласно уравнениям движения Ньютона, отвечающим этому классическому гамильтониану. Скорость определяется соотношением $dx/dt = \partial H / \partial p_x = (1/\hbar) \partial E_n / \partial k_x$. Его нужно взять для значения \mathbf{k} , равного $(\mathbf{p} + e\mathbf{A})/\hbar$, причем, как отмечалось выше, векторный потенциал \mathbf{A} следует выбрать так, чтобы его значение в центре тяжести волнового пакета равнялось нулю. Поэтому скорость оказывается такой же, как и в отсутствие магнитного поля, согласно формуле (П1.4).

Другое уравнение Гамильтона, определяющее dp_x/dt , более сложно, хотя пользоваться им надо так же, как в классической механике. Мы имеем

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial E_n}{\partial k_x} \left(-\frac{e}{\hbar} \frac{\partial A_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial E_n}{\partial k_y} \left(-\frac{e}{\hbar} \frac{\partial A_y}{\partial x} \right) + \frac{\partial E_n}{\partial k_z} \left(-\frac{e}{\hbar} \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) - \frac{\partial V_1}{\partial x}. \quad (\text{П1.36})$$

Воспользуемся формулой (П1.4) для скорости, и, обозначив через v_x , v_y и v_z компоненты средней скорости волнового пакета, получим

$$\frac{dp_x}{dt} = -e \left(v_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_y}{\partial x} + v_z \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) - \frac{\partial V_1}{\partial x}. \quad (\text{П1.37})$$

Вспомним далее, что $\mathbf{p} + e\mathbf{A} = \hbar\mathbf{k}$. Тогда

$$\frac{dp_x}{dt} = \hbar \frac{dk_x}{dt} - e \frac{dA_x}{dt}. \quad (\text{П1.38})$$

Мы считаем, что магнитное поле не зависит от времени, так что $\partial A_x / \partial t = 0$. Однако в величину dA_x/dt будет входить и член, не равный нулю, вследствие движения волнового пакета. Хотя в тот момент времени, к которому мы относим наш расчет, векторный потенциал по способу выбора равен нулю в области расположения волнового пакета, положение изменится при сдвиге пакета в точку с несколько иным векторным потенциалом. Фактически мы имеем

$$\frac{dA_x}{dt} = \frac{\partial A_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial A_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial A_x}{\partial z}. \quad (\text{П1.39})$$

Положим в (П1.39) $\partial A_x / \partial t = 0$, подставим результат в уравнение (П1.38) и получим

$$\begin{aligned} \hbar \frac{dk_x}{dt} &= -e \left[v_y \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) - v_z \left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) \right] - \frac{\partial V_1}{\partial x} = \\ &= -e [\mathbf{E} + (\mathbf{v} \times \mathbf{B})]_x. \end{aligned} \quad (\text{П1.40})$$

Здесь мы учли также, что $-\partial V_1 / \partial x = -eE_x$ ($-eE_x$ — произведение заряда $-e$ на x -компоненту напряженности электрического поля E_x) и что $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$.

Иначе говоря, волновой пакет движется в k -пространстве согласно второму закону Ньютона, в котором сила определяется по обычным правилам электромагнитной теории через электрическое и магнитное поля. Скорость v , входящая в уравнение (П1.40), есть средняя скорость волнового пакета, определяемая формулой (П1.4). Следует напомнить, однако, что, хотя это выражение выглядит как классическое уравнение движения, в действительности оно имеет совершенно иную природу, ибо равенство (П1.4) определяет неклассическую связь между скоростью и волновым вектором k или соответствующим ему квазиимпульсом $k\hbar$. Различия в поведении волнового пакета и классической частицы рассмотрены в основном тексте.

Отметим, наконец, условия применимости наших рассуждений. Мы явно ограничились рассмотрением только таких полей, которые медленно изменяются в пространстве. Другое предположение, которое явно не отмечалось, состоит в следующем. Предполагалось, что волновой пакет, который в начальный момент времени можно разложить по блоховским функциям или по функциям Ваннье, принадлежащим n -й зоне, будет развиваться таким образом, что и в дальнейшем его можно будет разложить только по этим функциям. Вообще говоря, это не так; волновые функции n -й зоны не составляют полного набора, и, строго говоря, следовало бы использовать функции всех зон. Однако коэффициенты при волновых функциях, относящихся к другим зонам, лишь медленно увеличиваются со временем. Можно показать, что чем медленнее изменяются поля в пространстве, тем медленнее растут вклады от других зон. Их возникновение, однако, указывает на отличную от нуля вероятность переходов из одной зоны в другие, обусловленную электрическим или магнитным полем. Эти переходы существуют, и им посвящены многочисленные исследования¹⁾, но мы больше не будем рассматривать их в этом томе.

ЛИТЕРАТУРА

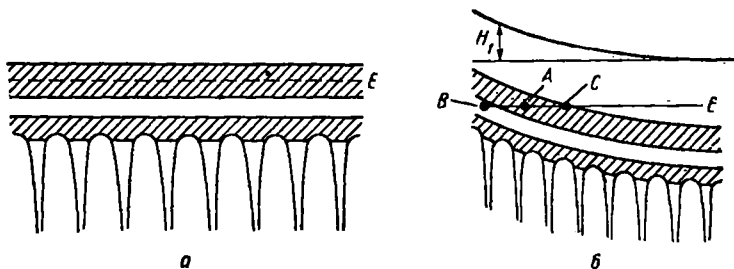
1. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 2, New York, 1965.
2. Jones H., Zener C., Proc. Roy. Soc., A144, 101 (1934).
3. Jones H., в книге «Handbuch der Physik», Bd. 19, Berlin, 1956, S. 231.
4. Slater J. C., Quantum Theory of Atomic Structure, vol. 1, New York, 1960.
5. Slater J. C., Phys. Rev., 76, 1592 (1949).
6. Zener C., Proc. Roy. Soc., A145, 529 (1934).
- 7*. Ансельм А. И., Введение в теорию полупроводников, М., 1962.
- 8*. Киттель К., Квантовая теория твердых тел, 2-е изд., изд-во «Наука», 1967.

1) См., например, [6].

2. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ

§ 1. Введение

В гл. 2, § 5, мы кратко описали поведение волновой функции вблизи примесных атомов. Этот вопрос будет рассмотрен более полно в настоящем приложении. Методы, которые мы используем, заимствованы главным образом из различных работ автора и Костера [1, 2] (см. также [3]). Некоторые из использованных идей были выдвинуты Джеймсом [4], аналогичные соображения можно найти в работах Фриделя [5] (см. также последующие работы этого автора). Примем за основу рассмотрения



Фиг. П2.1. Периодический потенциал и энергетические зоны (заштрихованы).

а — энергетические зоны и потенциал сдвинуты вверх на величину H_1 (изображенную верхней кривой); *б* — линия постоянной энергии E пересекает зону в точке *А*, расположенной на той же относительной высоте, что и энергия E' на фиг. П2.1, *а*. *В* и *С* — точки поворота при колебательном движении частицы.

методы, описанные в общих чертах в приложении 1; этот подход обсуждается также в более простой трактовке в работах [2].

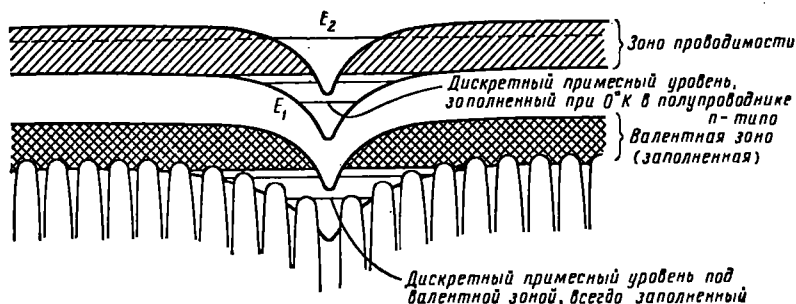
Начнем с обобщения полезного графического метода в задаче с периодическим потенциалом и с возмущением такого типа, какое вносил бы примесный атом (ср. гл. 5, § 2). Этот подход аналогичен рассмотрению задачи Джеймсом [4]. Указанный потенциал для одномерного случая изображен на фиг. П2.1. На фиг. П2.1, *а* схематически представлен периодический потенциал с соответствующими энергетическими зонами. На фиг. П2.1, *б* показаны энергетические зоны, в каждой точке x сдвинутые

вверх на величину $V_1(x)$, или $H_1(x)$, т. е. на величину потенциала возмущения, введенного в приложении 1. Мы провели также горизонтальную линию, отвечающую постоянной энергии E . Если функция H_1 медленно изменяется в пространстве, то мы можем считать, что импульс и скорость волнового пакета определяются положением уровня E по отношению к энергетическим зонам так же, как это было бы в отсутствие H_1 . Например, в точке A на фиг. П2.1, б энергетический уровень E расположен по отношению к энергетическим зонам так же, как и уровень E' на фиг. П2.1, а. Поэтому в точке A при наличии потенциала H_1 длина волны де Бройля, соответствующая волновой функции Ψ , будет такой же, как и для синусоидальной функции, отвечающей энергии E' на фиг. П2.1, а. Если уровень E на фиг. П2.1, б находится вне любой из энергетических зон, то длина волны оказывается мнимой, волновая функция экспоненциально затухает и скорость волнового пакета также будет мнимой. Когда энергия E лежит внутри одной из зон, длина волны вещественна, что соответствует вещественной скорости волнового пакета. Скорость убывает до нуля, когда энергия E приближается к краю зоны.

Рассмотрим классическую частицу с энергией E , движение которой описывается классическим гамильтонианом $E_0(p) + H_1(q)$, где p и q — соответственно импульс и координата, а величина $E_0(p)$ подобна выражению $E_n(p/\hbar)$ в формуле (П1.22). Эта частица осциллировала бы между точками типа B и C на фиг. П2.1, б, изменяя направление движения на обратное в каждой точке, где ее скорость обращается в нуль; квантованная частица будет подчиняться квантовым условиям. Такая картина, как подчеркнул Джеймс, позволяет нам выяснить характер стационарных состояний и волновых функций в данной задаче. Если, например, напряженность внешнего поля, описываемого возмущением H_1 , постоянна в пространстве, так что энергетические зоны наклонены под постоянным углом, то электрон будет совершать колебания вперед и назад в координатном пространстве с очень большой амплитудой (в случае небольшого внешнего поля), причем одновременно с этим его положение в энергетической зоне будет пробегать значения от дна до вершины и обратно, как мы выяснили в гл. 2, § 2.

Рассмотрим теперь применение этого метода в случаях, фактически встречающихся в теории твердых тел. Обратимся для начала к примесным атомам p - и n -типа в полупроводнике. Ситуацию с полупроводником n -типа несколько легче понять, и мы рассмотрим ее в первую очередь, как и в соответствующих рассуждениях гл. 2, § 5. Если атом теряет один электрон, то остающегося числа их достаточно для того, чтобы атом долж-

ным образом поместился в решетке, но при этом, поскольку он несет положительный заряд, он вносит в решетку кулоновский потенциал, абсолютная величина которого изменяется за счет диэлектрической проницаемости. Поэтому энергетические зоны под влиянием этого кулоновского потенциала примут вид, изображенный на фиг. П2.2. При таком строении зон, очевидно, существует возможность возникновения дискретных энергетических уровней водородоподобного типа с энергиями вида E_1 . Компенсируя эти уровни, которые, будучи заполнены, вносили бы добавочный заряд в окрестности примеси, мы увидим, что электроны с более высокими энергиями в зоне (типа E_2) будут



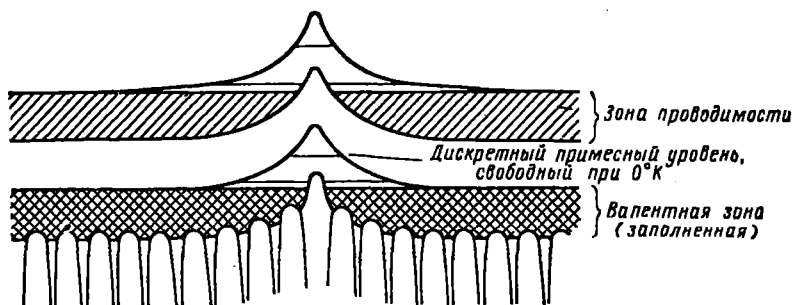
Фиг. П2.2. Непрерывный спектр и дискретные уровни вблизи примесного атома в полупроводнике n -типа.

E_1 — энергия дискретного уровня; E_2 — энергия уровня в непрерывном спектре.

эффективно отталкиваться, если они слишком близко подойдут к примесному атому; их скорость упадет до нуля, и электроны будут поворачиваться в обратную сторону в той точке, где линия высоты E_2 выходит за верхнюю границу энергетической зоны. Поэтому эти другие состояния обеспечат более низкую по сравнению с нормальной плотность заряда вблизи примеси, так что, когда все зонные состояния заняты электронами, суммарного заряда окажется все же как раз достаточно, чтобы на каждый атом, включая и примесный, приходилось в зоне по одному электрону с каждым значением спина. Этот вывод, особо отмеченный Фриделем [3], мы обсудим более подробно ниже, в § 3. В полупроводнике n -типа все эти уровни нового типа являются заполненными в нижней, или валентной, зоне. Остается, однако, еще один лишний электрон, приходящийся на примесный атом, и при низких температурах он попадает на самый нижний дискретный уровень под верхней зоной, называемой также зоной проводимости, но при незначительном по-

вышении температуры будет возбуждаться, переходя на один из уровней зоны проводимости.

Случай полупроводника p -типа рассматривается аналогичным образом. Примесный атом p -типа обычно имеет на один валентный электрон меньше, чем атом решетки, например атом Al или B в решетке Si или Ge. Если такой атом снабдить добавочным электроном, превратив его в отрицательный ион, то он будет обладать нужным числом электронов, чтобы должным образом разместиться в решетке. В таком случае искривленные энергетические зоны будут выглядеть так, как изображено на фиг. П2.3. Отсюда ясно, что должны возникнуть дискретные



Фиг. П2.3. Непрерывный спектр и дискретные уровни вблизи примесного атома в полупроводнике p -типа.

уровни, лежащие выше каждой из зон, причем за счет волновых функций состояний, находящихся у дна зоны, образуется компенсирующее уменьшение электронной плотности. В нейтральном кристалле должно приходиться по одному электрону на каждый примесный атом. Это меньше, чем необходимо, чтобы целиком заполнить валентную зону, так что при низких температурах на дискретных уровнях электронов не будет. Однако при повышении температуры электрон часто будет отсутствовать на каком-либо из зонных уровней непрерывного спектра, что приводит, следовательно, к дырочной проводимости.

Неоднократно обсуждавшаяся (см., например, работу [8]) задача о возбужденных энергетических уровнях в кристалле более запутана, но подобна рассмотренным случаям с примесями. По-видимому, легче всего разобраться в такой ситуации, когда сильно связанный (так сказать, рентгеновский) электрон возбуждается в зону проводимости. Когда атом кристалла теряет один из внутренних электронов, он ведет себя в отношении своих валентных свойств примерно так, как атом с увели-

ченным на единицу зарядом ядра. Отсутствующий электрон может играть роль добавочного валентного электрона. Таким образом, атом временно выступает в роли примесного атома n -типа и создает дискретные энергетические уровни, как на фиг. П2.2. При наблюдении спектра излучения, отвечающего падению электрона из области валентной зоны на пустой рентгеновский уровень, могут осуществиться две возможности: электрон может уйти с одного из уровней непрерывного спектра валентной зоны, но он может перейти и с одного из дискретных уровней, расположенных под валентной зоной, в результате чего излучение окажется более длинноволновым, чем должно быть в ином случае. Такие «хвосты» обнаружены в опытах по наблюдению мягкого рентгеновского излучения.

Случай настоящего оптического возбуждения, когда электрон переводится из валентной зоны в зону проводимости, более сложен в том отношении, что как электрон, так и дырка весьма подвижны. В таком случае ситуацию лучше всего описать по существу так, как это сделал Ваннье [6] и еще раньше Френкель [7, 8]. При классическом рассмотрении задачи мы считаем, что электрон в зоне проводимости притягивает дырку в валентной зоне и, поскольку их эффективные массы сравнимы по величине, каждый из них движется по водородоподобным орбитам вокруг общего центра массы, что отвечает пребыванию системы в одном из дискретных состояний. Энергии этих дискретных состояний лежат ниже непрерывного спектра; иными словами, электрон эффективно находится у дна зоны проводимости, словно в каком-либо дискретном состоянии в полупроводнике n -типа (см. фиг. П2.2), в то время как положительная дырка находится в состоянии у вершины валентной зоны, подобном дискретным состояниям в полупроводнике p -типа (см. фиг. П2.3). Электрон и дырка совместно составляют устойчивый комплекс, который, однако, ввиду подвижности электрона и дырки способен свободно блуждать по объему кристалла, образуя так называемый экситон. Будучи нейтральным образованием, он не является носителем тока. Для образования экситона требуется меньшая энергия, чем для того, чтобы забросить электрон из валентной зоны в зону проводимости, когда электрон и дырка не связаны друг с другом и способны двигаться независимо. Поэтому длина волны поглощения, соответствующего экситонному уровню и не дающего вклада в фотопроводимость, больше, нежели предельная длина волны для фотопроводимости. Существование таких экситонных уровней хорошо известно, например, в щелочногалогидных кристаллах (см. [9]). В следующем томе этой серии будет дано дальнейшее, более подробное рассмотрение теории экситонов.

§ 2. Статистическое рассмотрение возмущенных периодических решеток

Изучение стационарных состояний электронов в возмущенной решетке, подобное тому, которое мы кратко наметили в предыдущем параграфе, составляет в действительности только половину задачи; нас интересует также вопрос о том, какие уровни будут заполнены, а какие пусты. В случае теплового равновесия, который мы только и будем рассматривать, мы должны дополнить нашу теорию, использовав статистику Ферми—Дирака: среднее число электронов с заданным значением спина в состоянии с полной энергией E определяется функцией Ферми $F(E)$, определенной согласно формуле (1.8). На этом основании и зная, кроме того, из приложения 1 волновые функции Ψ_n , мы можем найти среднюю плотность заряда в каждой точке решетки. Совершенно не обязательно, чтобы эта плотность заряда автоматически равнялась нулю, поэтому мы будем иметь распределение пространственного заряда и отсюда с помощью уравнения Пуассона сможем вычислить электростатический потенциал. Затем можно наложить условие самосогласованности, по существу, хартриевского типа; мы можем потребовать, чтобы потенциальная энергия электрона в этом потенциале равнялась именно величине $H_1(q)$, обуславливающей возмущение энергетических зон.

Чтобы ввести наше условие самосогласованности, нужно прежде всего найти результирующую плотность заряда как функцию пространственных координат, отвечающую принятому нами ходу энергетических зон и предположительно выбранному значению уровня Ферми. Эту задачу мы решим так же, как в гл. 2, § 5, для невозмущенного периодического потенциала. В случае такого потенциала пусть число энергетических уровней в энергетическом интервале dE в расчете на единицу объема будет равно $(dN/dE)dE$; эту величину, как известно, можно найти, определив объем импульсного пространства, заключенный между поверхностями $E_0(\mathbf{p}) = E$ и $E_0(\mathbf{p}) = E + dE$, поскольку в случае периодического потенциала состояния распределены в импульсном пространстве с однородной плотностью. В запрещенных энергетических зонах величина dN/dE , конечно, равна нулю. Пусть N_0 — число электронов в единичном объеме, необходимое для обеспечения электрической нейтральности кристалла. Тогда при произвольном значении E_F число избыточных электронов в единице объема составляет

$$N(E_F) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dN/dE}{\exp(E - E_F)/kT + 1} dE - N_0. \quad (\text{П2.1})$$

Обычно, как и в гл. 2, § 5, мы определяем значение E_F из условия, что величина $N(E_F)$ должна быть равна нулю, т. е. решетка не заряжена. Однако мы рассматриваем теперь иную задачу: мы хотим исследовать распределение объемного заряда в решетке, обусловленное тем, что величина $N(E_F)$ не равна нулю, а, напротив, является медленно изменяющейся функцией координат. Ввиду наличия такого объемного заряда потенциал в решетке будет отличаться от периодического потенциала медленно меняющейся функцией, определяемой распределением объемного заряда согласно уравнению Пуассона. Пусть, как и прежде, H_1 есть потенциальная энергия электрона в этом плавно изменяющемся потенциале. Поскольку плотность заряда равна $-N(E_F)e$, где e — абсолютная величина заряда электрона, уравнение Пуассона в единицах МКС записывается следующим образом:

$$\nabla^2 H_1 = - \frac{N(E_F) e^2}{\epsilon}. \quad (\text{П2.2})$$

Здесь ϵ — диэлектрическая проницаемость материала, равная диэлектрической постоянной, умноженной на ϵ_0 .

При наличии плавно меняющегося потенциала выражение для величины dN/dE уже не будет, конечно, иметь прежний вид. Из предыдущего параграфа мы знаем, однако, что под влиянием H_1 энергетические зоны сдвигаются вверх от своего первоначального положения на величину, равную локальному значению H_1 . Представляется разумным считать, что число избыточных электронов в единице объема будет тогда определяться величиной $N(E_F - H_1) = N(\xi)$, где функция N задается формулой (П2.1) и введено сокращенное обозначение $\xi = E_F - H_1$. Предположение, которое мы при этом делаем, в известной мере аналогично допущению, свойственному методу Томаса—Ферми и принятому нами в гл. 10, когда мы условились считать, что статистическое распределение энергетических уровней электронов в каждой точке пространства будет таким же, как и для свободных электронов, движущихся в поле постоянного потенциала, равного по величине локальному значению фактического потенциала. Наш метод отличается от приближения Томаса—Ферми в трех отношениях: а) мы рассматриваем кинетическую энергию в настоящей задаче с помощью метода энергетических зон, считая ее равной величине $E_0(\mathbf{p})$, а не обычному выражению; б) мы оперируем с модулирующей функцией $\Psi_n(q)$ вместо истинной волновой функции $\Psi(q)$; в) статистическое рассмотрение в нашей теории проводится в форме, пригодной для произвольной температуры, а не только

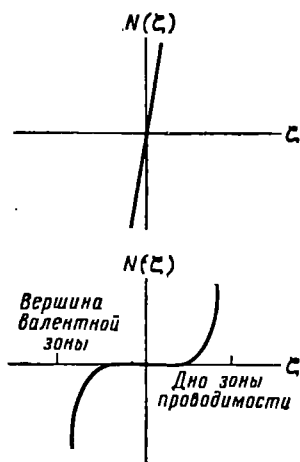
для абсолютного нуля температуры, как это делается в обычном методе Томаса—Ферми.

Используя вышеуказанное предположение, можно записать уравнение Пуассона в следующем виде:

$$\nabla^2 \zeta = N(\zeta) \frac{e^2}{\epsilon}. \quad (\text{П2.3})$$

Здесь учтено то обстоятельство, что величина E_F должна быть постоянной повсюду в пространстве, чтобы выполнялось условие термодинамического равновесия в случае статистики Ферми, и потому лапласиан E_F равен нулю. Уравнение (П2.3) совместно с определением (П2.1) функции N является общей формулировкой задачи об отыскании электростатического потенциала в твердом теле в условиях термодинамического равновесия. Это уравнение было использовано и в частных случаях решено многими авторами. Шоттки применял по существу это уравнение (см. [10] и другие работы, указанные в данной статье); аналогичный подход использовали Мотт и Герни [11]. Тот же метод использовал Фэн [12] в своих исследованиях по физике контактов между металлами и между металлом и полупроводником.

Характер решения уравнения (2.3) зависит от вида функции $N(\zeta)$. На фиг. П2.4 эта функция изображена для двух хорошо изученных случаев металла и собственного полупроводника. В первом случае величина N очень быстро возрастает с удалением ζ от значения, соответствующего отсутствию полного заряда, и в значительной области ее можно считать пропорциональной отклонению $\zeta - \zeta_0$, где величина ζ_0 относится к незагруженному металлу. В случае полупроводника, однако, N возрастает очень медленно с ростом $\zeta - \zeta_0$ и ведет себя приблизительно как гиперболический синус этого аргумента, но, когда значения ζ , положительные или отрицательные, становятся настолько велики по абсолютной величине, что уровень Ферми заходит или в верхнюю зону, зону проводимости, или в нижнюю, валентную зону, тогда N начинает очень сильно возрастать в сторону положительных или отрицательных значений соответственно. Как видно, эта вторая кривая идентична



Ф и г. П2.4. $N(\zeta)$ как функция ζ .

Наверху — случай металла; внизу — случай собственного полупроводника.

изображенной на фиг. П2.3. Если функцию $N(\zeta)$ можно приближенно записать как $a(\zeta - \zeta_0)$, где a — константа, что допустимо в обширной области энергий в обоих рассматриваемых случаях, то уравнение (П2.3) с математической точки зрения принимает форму волнового уравнения, решения которого могут быть построены известными методами. Таким образом, в случае одномерной задачи мы имеем решения

$$\zeta - \zeta_0 = \exp\left(\pm \frac{x}{X}\right), \quad \text{где} \quad X = \left(\frac{e}{ae^2}\right)^{1/2}. \quad (\text{П2.4})$$

Здесь x — координата в направлении изменения потенциала. Как показал Фэн [12], вошедшая сюда длина X для металла очень мала — порядка ангстрема. С другой стороны, для собственного полупроводника эта длина становится большой, а в предельном случае низких температур она обращается в этих условиях в бесконечность. В трехмерной задаче со сферической симметрией мы аналогичным образом получаем

$$\zeta - \zeta_0 = \frac{\exp(\pm r/X)}{r}, \quad (\text{П2.5})$$

где r — расстояние от центра, а определение длины X дано выше.

Мы можем исследовать теперь несколько приложений этих простых результатов. Рассмотрим сначала случай металла, ограничиваясь одномерной задачей. Подобная ситуация встречается при исследовании вопроса о поверхностном заряде на свободной поверхности металла во внешнем электрическом поле. Очевидно, граничные условия можно подобрать таким образом, чтобы электрическое поле на поверхности, определяемое градиентом H_1 , имело любую желаемую величину и, кроме того, чтобы соответствующее потенциальное поле проникало в металл только на расстояние порядка одного атомного слоя, так что связанная с ним плотность заряда была бы ограничена по глубине тем же самым тонким слоем. Другими словами, это позволяет нам предполагать, что на поверхностном слое атомов металла может находиться поверхностный заряд произвольной плотности, достаточный для того, чтобы удовлетворить любым граничным условиям на внешней поверхности металла. Аналогично если два связанных электрически металлических образца расположены близко друг к другу, так что они должны приобрести поверхностные заряды такой величины, чтобы обусловленная ими разность потенциалов была равна разности их работ выхода, то образование этих поверхностных зарядов происходит точно по таким же правилам. Когда металлы находятся в непосредственном контакте друг с другом, двойной слой,

который возникает на границе, образуется из поверхностных зарядов одного типа на обеих поверхностях. Это описание двойного слоя подробно развито Фэном [12].

Другой пример, связанный с металлом, относится к задаче со сферической симметрией. Пусть в металле имеется примесный атом подобно тому, что мы обсудили в гл. 2, § 5, для случая полупроводника, тогда потенциал будет обладать локальной сингулярностью. При этом решение, которое мы должны использовать, будет иметь вид (П2.5)

$$\zeta = \zeta_0 + \text{const} \frac{\exp(-r/X)}{r}. \quad (\text{П2.6})$$

Оно имеет особенность при $r = 0$, но убывает экспоненциально до нуля на расстоянии порядка атомных размеров. Другими словами, электроны проводимости будут настолько эффективно экранировать примесный атом, что он не создаст заметного возмущения потенциала вне области расположения атомов — его ближайших соседей. Этот результат, конечно, хорошо известен.

Мы можем рассмотреть эти же самые две задачи для случая собственного полупроводника, имея в виду, что длина X здесь очень велика. Это означает, что в таком материале, являющемся практически диэлектриком, величина заряда, который может накопиться во внутренней области, пренебрежимо мала, и потому, если этими свойствами обладает весь материал (включая и поверхностные слои), мы не можем получить тонкий поверхностный слой заряда, как это возможно в случае металла. Вместо этого, когда подобный диэлектрик помещен во внешнее электрическое поле, нормальное к его поверхности, последнее проникает сквозь поверхность внутрь, причем нормальная компонента индукции D непрерывна, как в обычной теории диэлектриков. Чтобы было возможно образование поверхностных зарядов (которые, безусловно, могут возникать на поверхности диэлектрика, например, при облучении электронами, когда у них не оказывается пути утечки), мы должны допустить существование поверхностных состояний, способных удерживать избыточный заряд. Мы опустим обсуждение этих поверхностных состояний в настоящей книге. Ограничиваясь внутренней областью собственного полупроводника, мы можем использовать при рассмотрении примесного атома сферически-симметричное решение нашего уравнения. При этом ввиду того, что наша длина X велика, мы находим, что поле изменяется по существу обратно пропорционально квадрату расстояния, а влияние диэлектрика проявляется только в наличии диэлектрической постоянной. Поэтому возмущенные энергетические зоны вокруг примесных атомов на наших фиг. П2.2 и П2.3

изображены верно, отражая тот факт, что потенциал изменяется обратно пропорционально расстоянию от примесного центра, не будучи экранированным характерным для металла способом.

§ 3. Метод разностного уравнения для примесных волновых функций

Из предыдущего параграфа следует, что потенциал вокруг примесного атома в металле является экранированным кулоновским потенциалом типа (П2.6). Он столь быстро (экспоненциально) убывает, что едва заметен за пределами области ближайших соседей. С другой стороны, в полупроводнике экспонента в формуле (П2.6) убывает так медленно, что ее можно практически не учитывать, и мы имеем обычный кулоновский потенциал. В последнем случае разумно, как мы указали в гл. 2, § 5, использовать приближение эффективной массы. При этом получается волновая функция Ψ_n водородоподобного вида, хотя энергетические уровни расположены значительно плотнее, и волновая функция отлична от нуля в значительно большей области пространства. Благодаря этому сильному размытию волновой функции довольно хорошо оправдываются приближения, сделанные нами в предыдущем параграфе относительно медленных изменений H_1 на межатомных расстояниях.

В случае металла, однако, ясно, что это приближение совершенно не законно, и даже для полупроводников возможны случаи с такими значениями параметров, что волновая функция спадает до нуля на нескольких межатомных расстояниях, и мы также не имеем права использовать наши приближения. В такой ситуации более подходящим оказывается другой метод рассмотрения, основанный непосредственно на уравнении (П1.15), а не на его модификации (П1.26), предложенной Ванье. Этот метод, приводящий к прямому решению разностных уравнений для Ψ_n , рассмотрен в вышеупомянутых работах Костера и Слэтера. Мы можем начать с уравнения (П1.15), воспользоваться (П1.16) и получить уравнение Шредингера для стационарного состояния с энергией E . Затем, положив

$$\Psi_n(\mathbf{R}, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) U_n(\mathbf{R}), \quad (\text{П2.7})$$

найдем

$$\sum_{\mathbf{R}_j} [\mathcal{L}_n(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) + V_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)] U_n(\mathbf{R}_j) = EU_n(\mathbf{R}_i), \quad (\text{П2.8})$$

где

$$V_n(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)(H_1) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) dv. \quad (\text{П2.9})$$

Уравнения (П2.8) и представляют собой систему разностных уравнений, обсуждавшуюся в упомянутых работах. На самом деле там рассматривалась более общая форма. Мы отметили в конце приложения 1, что, строго говоря, разложение возмущенной волновой функции нельзя провести только по функциям Ванье одной зоны. Заменяем выражение типа (П1.13), не зависящее от времени, более общим

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n, \mathbf{R}_j} U_n(\mathbf{R}_j) a_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (\text{П2.10})$$

где мы проводим теперь суммирование по всем функциям Ванье всех энергетических зон, т. е. по полному набору базисных функций. Вместо уравнения (П2.8) мы получим тогда

$$\sum_{m, \mathbf{R}_j} [\mathcal{E}_n(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \delta_{nm} + V_{nm}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)] U_m(\mathbf{R}_j) = E U_n(\mathbf{R}_i); \quad (\text{П2.11})$$

где

$$V_{nm}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) = \int a_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H_1 a_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{v}. \quad (\text{П2.12})$$

Очевидно, оно сводится к (П2.8) в том случае, когда отбрасываются функции Ванье всех зон, кроме одной.

Чтобы лучше представить себе действие возмущения, почти полностью локализованного на одиночном атоме, как в случае металлической примеси, решим простую одномерную задачу, обладающую многими характерными чертами исходной общей задачи. Рассмотрим одномерный кристалл, составленный из атомов, находящихся на равных расстояниях друг от друга, и ограничимся рассмотрением одной зоны, описывая ее с помощью функции Ванье, симметричной по отношению к отражению в плоскости, проходящей через атом, на котором она локализована. В этом случае уравнение (П2.8) можно записать в виде

$$\sum_q [\mathcal{E}(p - q) + V(p, q)] U(q) = E U(p). \quad (\text{П2.13})$$

Индекс p отвечает p -му атому цепочки. Наиболее простым примером задачи о примеси в линейной цепочке является такой случай, когда взаимодействие захватывает только функции Ванье ближайших соседей и примесь находится лишь в одном узле этой одномерной решетки. Первое из этих ограничений означает, что $\mathcal{E}(p) = 0$ для $p > 1$. Согласно второму предположению, величина $V(p, q)$ не равна нулю только при p и q ,

одновременно равных нулю. В таком случае наши разностные уравнения (П2.13) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(0)U(p) + \mathcal{E}(1)[U(p+1) + U(p-1)] &= EU(p), \quad p \geq 1, \\ \mathcal{E}(0)U(0) + \mathcal{E}(1)[U(1) + U(-1)] &= [E - V(0)]U(0), \quad p = 0. \end{aligned} \quad (\text{П2.14})$$

Будем решать систему уравнений (П2.14) (первый набор, отвечающий $p \geq 1$) обычным способом, предполагая, что $U(p) = b^{\pm p}$. Подставляя это выражение в первое из уравнений (П2.14), видим, что он действительно представляет собой решение, если выполняется следующее условие:

$$\mathcal{E}(0) + \mathcal{E}(1) \left(b + \frac{1}{b} \right) = E. \quad (\text{П2.15})$$

Положив $b = \exp(ikR)$, где R — параметр решетки, преобразуем условие (П2.15) к виду

$$\mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1) \cos kR = E. \quad (\text{П2.16})$$

Заметим, что в этом соотношении величина k может быть либо вещественной, либо комплексной. Фактически мы можем сразу установить, что если E удовлетворяет неравенству $|E - \mathcal{E}(0)|/2\mathcal{E}(1) > 1$, то величина k должна быть чисто мнимой; а если выполняется обратное неравенство, то k — вещественная величина. В последнем случае состояния находятся в зоне. Для них, очевидно, коэффициенты при всех функциях Ванье по абсолютной величине равны единице; эти состояния описывают распространение электронов в кристалле. Для состояний с чисто мнимыми значениями k коэффициенты при функциях Ванье экспоненциально возрастают при больших положительных или отрицательных значениях p .

Теперь нужно решить второе из уравнений (П2.14). Наложим периодические граничные условия, т. е. потребуем, чтобы $U(p + 2N) = U(p)$, и начнем с обсуждения случая, когда энергия попадает в зону (значение k вещественно). Мы замечаем сразу, что по симметрии задачи наши решения должны быть или симметричными, или антисимметричными относительно центрального атома. В первом случае $U(p) = U(-p)$, во втором $U(p) = -U(-p)$. Для антисимметричного состояния волновая функция имеет в начале координат узел, и, следовательно, наша задача с возмущением сводится просто к невозмущенной задаче. Легче всего это можно уяснить, учитывая условия антисимметрии непосредственно в разностном уравнении. При этом видно, что член, связанный с возмущением, полностью выпадает из уравнения. Для этого случая мы берем в качестве решения функцию $U(p) = \sin kRp$, которая удовлет-

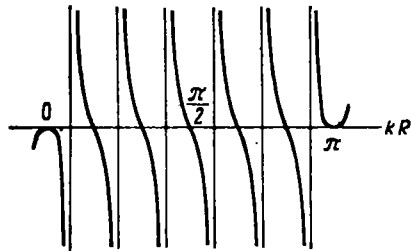
воряет граничным условиям, если $kRN = n\pi$. Это решение является, конечно, линейной комбинацией двух частных решений b^p и b^{-p} . Очевидно, имеется всего $N - 1$ антисимметричных решений.

Решение для симметричных состояний удобнее всего искать в виде $\cos kR(p - N)$ для значений p в интервале от нуля до $2N$. В такой форме решение автоматически удовлетворяет граничному условию при $p = N$. Значение энергии непосредственно определяется из уравнения (П2.16). Подставляя решение указанного вида в уравнение (П2.14) для $p = 0$, получаем следующее условие:

$$-\operatorname{tg}(kRN) \sin(kR) = \frac{V(0)}{2\mathcal{E}(1)}. \quad (\text{П2.17})$$

При выводе его мы использовали тот факт, что значение E определяется уравнением (П2.16). Имеется всего N решений такого симметричного типа. Уравнение (П2.17) можно решить графически, изобразив его ле-

вую часть как функцию k и найдя те значения k , для которых она равна величине $V(0)/2\mathcal{E}(1)$. График этой функции для $N=6$ в зависимости от аргумента kR приведен на фиг. П2.5. Мы видим, что ось абсцисс пересекает эту кривую в семи точках. Для других горизонтальных линий, когда имеется только шесть точек пересечения, отсутствует то состояние, для которого значение k чисто мнимо. Вместе с этим состоянием полное число симметричных состояний равно $N + 1$, что дает вместе с $N - 1$ антисимметричными состояниями требуемое общее число состояний $2N$. Исследуем теперь более подробно состояние, соответствующее мнимому значению k .



Фиг. П2.5. Функция $-\operatorname{tg}(kRN) \times \sin(kR)$ для $N=6$.

Для мнимого k обозначим ik через γ . В этом случае значение E таково, что оно лежит вне зоны. При этом наше решение разностного уравнения имеет вид $\exp(\pm \gamma pR)$. Очевидно, коэффициенты при наших функциях Ванье экспоненциально возрастают в одном направлении. Мы могли бы действовать, как и прежде, и строить связанное состояние, удовлетворяющее нашим периодическим граничным условиям, но можно легко показать, что для больших N точно к тому же результату можно прийти, потребовав, чтобы наша волновая функция стремилась

к нулю для бесконечно больших значений p . Если поступить таким образом, то решение первого из уравнений (П2.14) для положительных p следует взять в виде $U(p) = U(-p) = \exp(-\gamma R p)$, откуда

$$E = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1) \operatorname{ch}(\gamma R). \quad (\text{П2.18})$$

Чтобы удовлетворить второму уравнению (П2.14), должно выполняться условие $\operatorname{sh}(\gamma R) = V(0)/2\mathcal{E}(1)$. Оно определяет значение γ , соответствующее заданному значению $V(0)$. Мы можем, конечно, выразив $\operatorname{ch}(\gamma R)$ через $\operatorname{sh}(\gamma R)$, получить следующее соотношение:

$$E = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1) \left\{ 1 + \left[\frac{V(0)}{2\mathcal{E}(1)} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (\text{П2.19})$$

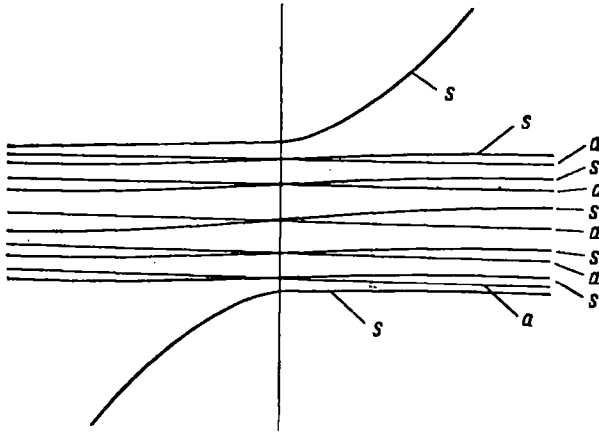
Оно показывает, что при малых значениях потенциала возмущения величина отщепления связанных состояний от зоны пропорциональна квадрату $V(0)$.

В приведенном рассуждении везде неявно предполагалось, что знак возмущения совпадает со знаком взаимодействия ближайших соседей. Это означает, что связанное состояние отщепляется от зоны в точке, где $E = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1)$. Если же знаки потенциала возмущения и взаимодействия ближайших соседей противоположны, то связанное состояние будет отщепляться от зоны в точке, где $E = \mathcal{E}(0) - 2\mathcal{E}(1)$. В этом случае, как легко заметить, решение разностного уравнения дается выражением $(-1)^p \exp(-\gamma R p)$. Энергия связанного состояния при этом определяется равенством (П2.19), в котором знак плюс перед квадратным корнем должен быть заменен на минус.

Итак, мы рассмотрели все наши $2N$ состояний. Имеется одно связанное состояние, $N - 1$ антисимметричных состояний в зоне и N симметричных зонных состояний. На фиг. П2.6 изображены энергии этих состояний для случая $N = 6$ в зависимости от величины потенциала возмущения. Для сравнения на графике представлены также энергии антисимметричных состояний, на которые возмущение не действует. Интересно отметить характер смещения каждого из энергетических уровней под воздействием возмущения: они приближаются к середине между соседними энергиями антисимметричных состояний лишь при достаточно больших возмущениях. Исключение составляет крайнее состояние, которое отщепляется от зоны и образует отдельное примесное состояние, рассмотренное выше. Приведенный график соответствует положительному значению $\mathcal{E}(1)$; при этом отдельный уровень появляется у верхнего края зоны при положительном $V(0)$. Изображенная картина отвечает случаю с малым значением N ; ясно, что при очень больших значениях N

смещения всех уровней, кроме одного, отщепляющегося от зоны, будут пренебрежимо малы.

Мы установили, что под действием возмущения $V(0)$ от энергетической зоны отщепляется одиночный энергетический уровень и что соответствующая волновая функция экспоненциально падает при удалении от возмущающего атома. Экспоненциальное затухание волновой функции становится чрезвычайно быстрым, когда возмущение $V(0)$ очень велико по



Фиг. П2.6. Энергия возмущенных энергетических уровней в зависимости от величины энергии возмущения.

s — уровни симметричного состояния; a — уровни антисимметричного состояния.

сравнению с шириной зоны, хотя для малых $V(0)$ оно происходит медленно. На данном этапе мы можем провести элементарную проверку законности процедуры предыдущих параграфов, в которых разностное уравнение заменялось дифференциальным. Возьмем за исходное выражение (П2.16) для энергии и заменим в нем k оператором $-id/dx$. Используя этот оператор, мы строим затем дифференциальное уравнение по типу уравнения (П1.24). В данном случае это приводит к следующему:

$$\mathcal{E}(0) \Psi(x) + 2\mathcal{E}(1) \left(\Psi + \frac{1}{2!} R^2 \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{4!} R^4 \frac{d^4\Psi}{dx^4} + \dots \right) + V(x) \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (\text{П2.20})$$

где $V(x)$ — потенциал возмущения, отличный от нуля только при $x=0$, так что при x , отличном от нуля, можно опустить член, содержащий V . Упрощенное уравнение Шредингера, соответ-

ствующее уравнению (П1.26), получается при пренебрежении в уравнении (П2.20) всеми членами с производными выше второго порядка. Теперь в рассматриваемом простом случае мы можем решить задачу либо в точной, либо в приближенной формулировке, полагая $\Psi = \exp(-\gamma x)$, причем единственное различие возникает в соотношении между γ и E , которое мы найдем. Подставляя предполагаемый вид волновой функции в уравнение (П2.20), получаем решение точного уравнения, если

$$E = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1) \left[1 + \frac{(\gamma R)^2}{2!} + \frac{(\gamma R)^4}{4!} + \dots \right] = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1) \operatorname{ch} \gamma R, \quad (\text{П2.21})$$

что совпадает с уравнением (П2.18). Если же, с другой стороны, мы пренебрежем производными четвертого и высших порядков, то получим выражение $E = \mathcal{E}(0) + 2\mathcal{E}(1)[1 + (\gamma R)^2/2]$, являющееся удовлетворительным приближением только тогда, когда величина $(\gamma R)^2$ мала по сравнению с единицей. Это имеет место в том случае, если волновая функция $\exp(-\gamma x)$ лишь незначительно затухает на расстоянии R , что согласуется с условием применимости дифференциального уравнения второго порядка последнего параграфа. Если возмущение более интенсивно, так что волновая функция затухает более быстро, и дополнительный уровень оказывается дальше от зоны, дифференциальное уравнение второго порядка неприменимо и следует использовать разностное уравнение или дифференциальное уравнение бесконечного порядка, которое, конечно, строго эквивалентно ему.

Прежде чем завершить обсуждение этого простого примера, поучительно рассмотреть с несколько иной точки зрения вопрос о состояниях внутри зоны. Для симметричных зонных состояний мы можем взять (для положительных p) решение вида

$$U(p) = U(-p) = \cos(kRp - \alpha).$$

(Мы уже не накладываем здесь периодических граничных условий.) При таком выборе решения энергия по-прежнему определяется уравнением (П2.16), а уравнение (П2.14) дает условие для величины α

$$\operatorname{tg} \alpha = - \frac{V(0)}{[2\mathcal{E}(1) \sin kR]}. \quad (\text{П2.22})$$

Этот результат примечателен тем, что он демонстрирует существование возмущенного зонного состояния, соответствующего произвольному значению энергии в зоне. Действие возмущения состоит лишь в том, что оно определяет фазу α . Можно было бы, конечно, построить теорию рассеяния в зоне, непосредственно связанную с рассмотрением этого фазового угла α . Заметим

также, что фазовый угол приближается к значению $\pi/2$ при стремлении $V(0)$ к бесконечности. При этом симметричное состояние в зоне стремится к нулю на возмущенном узле. Это означает, что возмущенные зонные состояния имеют тенденцию «обойти» примесный узел, тогда как связанное состояние, выпавшее из зоны, становится все более концентрированным вокруг примесного узла, как указывалось в § 1 данного приложения. Ясно, что это свойство должно иметь весьма общий характер.

Рассмотрим случай периодических граничных условий. Мы строим волновые функции в виде линейных комбинаций $2N$ функций Ванье атомов основной длины периодичности. Эти функции Ванье, так же как и окончательные линейные комбинации, составляют ортонормированный набор, так что совокупность величин $U(p)$, являющихся коэффициентами преобразования от одного набора функций к другому, образует унитарную матрицу. Эта матрица содержит $2N$ строк и столбцов, поскольку имеется $2N$ энергетических уровней и $2N$ значений p . Если теперь составить сумму произведений $U^*(p)U(p)$ по всем $2N$ энергетическим уровням для заданного значения p , то, как известно, по свойству унитарности эта сумма должна быть равна единице. Будем считать, что это суммирование проведено для значения $p=0$, соответствующего примесному атому. Относительно отделившегося состояния в случае сильного потенциала возмущения $V(0)$ нам известно, что его волновая функция затухает как $\exp(-\gamma Rp)$, где значение γ очень велико; следовательно, коэффициенты $U(p)$ будут очень малы для $p \neq 0$. Поскольку волновая функция должна быть нормирована, сумма произведений $U^*(p)U(p)$ по p для фиксированного энергетического уровня должна равняться единице, а отсюда следует, что, поскольку вклады в сумму, соответствующие $p \neq 0$, очень малы, член с $p=0$ должен быть очень близок к единице. Вспомним теперь, что, как мы установили, сумма величин $U^*(p)U(p)$ по всем энергетическим уровням при фиксированном p должна быть равна единице. Для $p=0$ вклады от всех других уровней, как мы только что выяснили, должны быть очень малы; это показывает, что в случае сильного возмущения волновые функции зонных состояний почти совсем не перекрываются с возмущающим атомом, на котором локализовано возмущение. Существенно то, что использованное здесь рассуждение имеет общий характер, поскольку оно может быть применено в более сложных случаях, когда точные решения найти невозможно.

Рассматривая этот простой пример, мы выяснили некоторые основные черты, проявляющиеся при непосредственном решении разностного уравнения. В работах [2], к которым мы отсылаем читателя, проведено значительно более глубокое исследование

дование задачи. Наш несложный пример прост в первую очередь потому, что потенциал возмущения V отличен от нуля лишь на одном атомном узле. В указанных работах рассматривается более общий случай, когда возмущение отлично от нуля на не большом числе атомных узлов. Показано, что в этом случае решение разностных уравнений можно свести к исследованию секулярной задачи с детерминантом, число строк и столбцов которого равно числу атомных узлов, где потенциал возмущения не равен нулю. Это упрощение осуществляется с помощью метода, являющегося модификацией метода функции Грина; сначала строится решение, соответствующее одиночному возмущенному узлу, весьма сходное с функцией, взятой в нашем простом примере, а затем строится линейная комбинация подобных функций, отвечающих различным узлам, на которых потенциал возмущения отличен от нуля, причем коэффициенты при различных функциях определяются из секулярного уравнения.

С помощью этого метода можно рассмотреть довольно сложные задачи и получить для них точные решения. В частности, оказывается возможным исследовать трехмерные задачи не только в случае локализации потенциала возмущения на одиночном атомном узле, но и тогда, когда возмущение отлично от нуля на ряде соседних узлов, что уже близко к ситуации, фактически имеющей место в задаче о примеси в металле. При этом выясняется, что возмущение должно достичь некоторой критической величины, чтобы возмущенное состояние отщепилось от непрерывного спектра. С увеличением интенсивности возмущения достигается сначала первое критическое значение, для которого имеется дискретное состояние s -типа, отделенное от непрерывного спектра энергетическим интервалом конечной величины. При дальнейшем увеличении возмущения отщепляется состояние p -типа и т. д. Иными словами, вместо возникновения бесконечного набора дискретных состояний, как это бывает в задаче водородоподобного типа в случае кулоновского потенциала, появляется только конечное число дискретных состояний, подобно тому что происходит в задаче с прямоугольной потенциальной ямой в обычной квантовой механике, т. е. когда потенциал постоянен вне некоторой сферы и равен также постоянной, но меньшей величине внутри этой сферы. В указанных работах показано, что между этой задачей с прямоугольной потенциальной ямой и реальной задачей о примеси в металле имеется очень большое сходство.

Мы лишь кратко описали эти общие методы рассмотрения примесных состояний, но в следующем томе они будут развиты в виде, удобном для трактовки таких случаев, как магнитные примеси в металлах. Подобные методы были использованы

также в задаче о колебаниях решетки для случая, когда решетка содержит один или большее число примесных атомов. При этом возможны локальные колебания, в которых участвует в основном сам примесный атом (или примесные атомы), причем возмущение экспоненциально затухает при удалении от него. Подобное рассмотрение было проведено Монтроллом и Поттсом [13], а также другими авторами, упомянутыми в библиографии.

Дальнейшее применение методы, описанные в данном приложении, находят в задачах о рассеянии волн в периодической среде, содержащей примесный атом. Эту задачу рассмотрел Костер [14] с помощью методов, непосредственно вытекающих из упомянутого выше метода функций Грина. В случае рассеяния электронных волн результаты непосредственно применимы к задаче об электрическом сопротивлении, обусловленном примесными атомами, — остаточном сопротивлении, упомянутом в гл. I. В случае рассеяния волн механических колебаний мы встречаемся с эффектом, обусловленным наличием примесных атомов, который состоит в появлении добавочного теплового сопротивления или в уменьшении теплопроводности вещества. В этой связи интересно отметить, что два различных атома элементов с одинаковым атомным номером, но с различными атомными весами будут совершенно по-разному вести себя в задаче о механических колебаниях, так что металл, являющийся смесью изотопов, будет обладать более высоким тепловым сопротивлением, или меньшей теплопроводностью, чем металл, состоящий из атомов только одного типа. Этот эффект наблюдается на опыте, и роль смещения изотопов оказывается поразительно большой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Slater J. C., Phys. Rev., **76**, 1592 (1949).
2. Koster G. F., Slater J. C., Phys. Rev., **94**, 1392 (1954), **95**, 1167 (1954); **96**, 1208 (1954).
3. Clogston A. M., Phys. Rev., **125**, 439 (1962).
4. James H. M., Phys. Rev., **76**, 1602, 1611 (1954).
5. Friedel J., Adv. Phys., **3**, 446 (1954).
6. Wannier G. H., Phys. Rev., **52**, 191 (1937).
7. Frenkel J., Phys. Rev., **37**, 17, 1276 (1931).
8. Frenkel J., Phys. Zs. Sowjetunion, **9**, 158 (1936).
9. Slater J. C., Shockley W., Phys. Rev., **50**, 705 (1936).
10. Schottky W., Zs. Phys., **118**, 539 (1941).
11. Mott N. F., Gurney R. W., Electronic Processes in Ionic Crystals, New York, 1940. (См. перевод: Мотт Н., Герни Р., Электронные процессы в ионных кристаллах, ИЛ, 1950.)
12. Fan H. Y., Phys. Rev., **62**, 388 (1942).
13. Montroll E. W., Potts R. B., Phys. Rev., **100**, 525 (1955); **102**, 72 (1956).
14. Koster G. F., Phys. Rev., **95**, 1436 (1954).

3. ЗАДАЧА О СВОБОДНОМ ЭЛЕКТРОНЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Наша задача состоит в том, чтобы решить в цилиндрических координатах уравнение (3.15), радиальное уравнение для электрона, движущегося в магнитном поле. Вместо r введем новую переменную, согласно равенству

$$\omega = \pi r^2 \frac{eB}{h}, \quad (\text{ПЗ.1})$$

откуда видно, что величина ω равна отношению площади πr^2 круга радиусом r к фундаментальной величине h/eB (размерности площади), с которой мы встретились в гл. 3, § 5. Введем также вместо энергии безразмерную величину W с помощью следующего уравнения:

$$E - \frac{e\hbar j B}{2m} - \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m} = W \frac{e\hbar B}{2m} = \frac{W}{2} \hbar \omega, \quad (\text{ПЗ.2})$$

где ω — циклотронная частота. Преобразуя уравнение (3.15) к форме записи, содержащей эти новые переменные, получаем

$$\frac{d^2 R}{d\omega^2} + \frac{1}{\omega} \frac{dR}{d\omega} - \frac{j^2}{4\omega^2} R + \frac{W}{2\omega} R - \frac{R}{4} = 0. \quad (\text{ПЗ.3})$$

Как показал Фок, это уравнение можно решить, положив

$$R = \omega^{1/2} e^{-\omega/2} F(\omega), \quad (\text{ПЗ.4})$$

где функция F подлежит определению. Подставляя это выражение в уравнение (ПЗ.3), находим, что функция F должна удовлетворять уравнению

$$\omega \frac{d^2 F}{d\omega^2} + (j+1-\omega) \frac{dF}{d\omega} + \frac{W-j-1}{2} F = 0. \quad (\text{ПЗ.5})$$

Решение этого уравнения для функции F выражается через полиномы Лагерра. Можно показать, что полином Лагерра L_q удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению¹⁾:

$$x \frac{d^{p+2}}{dx^{p+2}} L_q + (p+1-x) \frac{d^{p+1}}{dx^{p+1}} L_q + (q-p) \frac{d^p}{dx^p} L_q = 0. \quad (\text{ПЗ.6})$$

¹⁾ Это доказано, например, в книге: J. C. Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, vol. 1, New York, 1960.

Отсюда видно, что в уравнении (П3.6) можно заменить p на j , q на $n+j$, тогда получим

$$x \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{d^l}{dx^l} L_{n+l} \right) + (j+1-x) \frac{d}{dx} \left(\frac{d^l}{dx^l} L_{n+l} \right) + n \frac{d^l}{dx^l} L_{n+l} = 0. \quad (\text{П3.7})$$

Это уравнение имеет точно такой же вид, что и уравнение (П3.5). Поэтому мы получим решение уравнения (П3.5), если положим

$$F = \frac{d^l}{dx^l} L_{n+j}, \quad W = 2n + j + 1, \quad (\text{П3.8})$$

$$E = \left(n + j + \frac{1}{2} \right) \frac{e\hbar B}{m} + \frac{k_z^2 \hbar^2}{2m}.$$

Найденное значение энергии совпадает с величиной, определяемой выражением (3.8), так как число $n+j$ должно быть целым и, как мы теперь видим, тождественно равным квантовому числу n , найденному иным методом. Для волновых функций, однако, мы получили другое выражение, но на основании общих принципов известно, что любая из волновых функций, соответствующих заданному значению $n+j$, должна выражаться в виде линейной комбинации функций, отвечающих тому же самому значению квантового числа и определенных по методу Ландау. Эта линейная комбинация может быть, однако, довольно сложной, и использование настоящего метода позволяет избежать необходимости ее отыскания.

Рассмотрим волновые функции. Функцию F , согласно уравнению (A15.7) цитированной выше книги, можно записать в виде

$$F = L_{n+j}^l(\omega). \quad (\text{П3.9})$$

На основании формул (A15.3) и (A15.4) той же книги эту функцию можно представить в виде полинома

$$L_{n+j}^l(\omega) = B_0 + B_1\omega + \dots + B_n\omega^n, \quad (\text{П3.10})$$

где

$$B_s = -B_{s-1} \frac{4(n+1-s)}{(j+2s-1)(j+2s+1)-(j-1)(j+1)}, \quad (\text{П3.11})$$

$$B_n = (-1)^{l+1} \frac{(a+j)!}{n!}.$$

Комбинируя эти выражения с определением ω (П3.1), получаем полное решение задачи. Это решение в ненормированном виде приведено в формуле (3.16).

4. МЕТОД ЭВАЛЬДА ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ; ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ КУБИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

В этом приложении мы специально рассмотрим применение метода Эвальда к случаю гранецентрированной кубической решетки, что требуется для исследования структуры хлористого натрия. Подробное вычисление потенциала ϕ в различных точках элементарной ячейки было выполнено для этого частного случая автором и де Сикко. Через a обозначено ребро кубической ячейки, как и в тексте (гл. 9, § 3). Расчет был проведен для сетчатого набора точек, в котором соседние значения x/a , y/a , z/a разделены интервалами, равными 0,05. Это составило бы $(20)^3 = 8000$ точек для кубической ячейки с ребром a , но, поскольку ячейка Вигнера — Зейтца занимает одну четвертую часть этого объема, в ней лежит 2000 точек. Вследствие симметрии имеется много эквивалентных точек с одинаковыми значениями потенциала, который, конечно, будет обладать полной симметрией неприводимого представления Γ_1 кубической точечной группы. Точка общего типа будет одной из 48 точек с одним и тем же значением потенциала, тогда как точке, отвечающей некоторой более высокой симметрии, будет соответствовать меньшее число эквивалентных точек. В табл. П4.1 приведены значения потенциала ϕ для этих точек решетки, вычисленные на основе уравнения (9.26). Для каждой тройки значений x/a , y/a , z/a приведена величина $a\phi$; потенциал пропорционален $1/a$, так что величина $a\phi$ безразмерна. В табл. П4.1 указаны веса каждой из точек, т. е. число эквивалентных точек, в которых потенциал одинаков. Сумма этих весов равна 2000, как нетрудно проверить прямым подсчетом. Расчеты, на основе которых получена табл. П4.1, были проведены для трех значений величины ae : 3, 5 и 7, и согласие результатов при всех трех способах выбора e подтверждает правильность метода и точность расчета. Ошибки в приведенных значениях должны составлять несколько единиц в последнем десятичном знаке.

Мы можем графически представить некоторые из результатов табл. П4.1. Так, на фиг. П4.1 изображен потенциал как функция расстояния от начала координат вдоль трех направлений: [001], [011] и [111]. Каждая из этих кривых непрерывным

Таблица П4.1

Значения $a\varphi$, вычисленные по формуле (9.26) для сетки точек, координаты которых x/a , y/a , z/a указаны в таблице

Совокупность точек заполняет всю ячейку Вигнера — Зейтца. Для каждого набора значений x/a , y/a , z/a в скобках указан вес соответствующей точки; его определение дано в тексте. Функция $a(\varphi_1 + \varphi_2)$ является аналитическим приближением, заданным формулами (П4.1) — (П4.4); в последнем столбце приведены значения ошибок, соответствующих этому аналитическому приближению.

$\frac{x}{a}$	$\frac{y}{a}$	$\frac{z}{a}$	Вес	$a\varphi$	$a(\varphi_1 + \varphi_2)$	$a(\varphi - \varphi_1 - \varphi_2)$
0	0	0	(1)			0,000000
0	0	0,05	(6)	15,436032	15,436048	-0,000016
0	0	0,10	(6)	5,498136	5,498154	-0,000018
0	0	0,15	(6)	2,266206	2,266254	-0,000048
0	0	0,20	(6)	0,736704	0,736810	-0,000106
0	0	0,25	(6)	-0,095932	-0,095702	-0,000230
0	0	0,30	(6)	-0,572664	-0,571965	-0,000699
0	0	0,35	(6)	-0,845511	-0,845349	-0,000162
0	0	0,40	(6)	-0,995141	-0,995494	0,000353
0	0	0,45	(6)	-1,068118	-1,068456	0,000338
0	0	0,50	(1)	-1,089730	-1,084727	-0,005003
0	0,05	0,05	(12)	9,599216	9,599224	-0,000008
0	0,05	0,10	(24)	4,463929	4,463873	0,000056
0	0,05	0,15	(24)	1,946518	1,946551	-0,000053
0	0,05	0,20	(24)	0,611266	0,611356	-0,000090
0	0,05	0,25	(24)	-0,147777	-0,147556	-0,000221
0	0,05	0,30	(24)	-0,589770	-0,589408	-0,000362
0	0,05	0,35	(24)	-0,843503	-0,843178	-0,000325
0	0,05	0,40	(24)	-0,981810	-0,982107	0,000297
0	0,05	0,45	(12)	-1,048532	-1,049702	0,001170
0	0,10	0,10	(12)	2,654861	2,654861	0,000000
0	0,10	0,15	(24)	1,236070	1,236326	-0,000256
0	0,10	0,20	(24)	0,304542	0,304543	-0,000001
0	0,10	0,25	(24)	-0,277616	-0,277473	-0,000143
0	0,10	0,30	(24)	-0,628521	-0,628026	-0,000495
0	0,10	0,35	(24)	-0,828892	-0,827908	-0,000984
0	0,10	0,40	(12)	-0,934037	-0,932950	-0,001087
0	0,15	0,15	(12)	0,514120	0,513989	0,000131
0	0,15	0,20	(24)	-0,047181	-0,047464	0,000283
0	0,15	0,25	(24)	-0,427399	-0,427275	-0,000124
0	0,15	0,30	(24)	-0,657413	-0,657145	-0,000268
0	0,15	0,35	(12)	-0,778107	-0,775919	-0,002188

Продолжение

$\frac{x}{a}$	$\frac{y}{a}$	$\frac{z}{a}$	Вес	$a\varphi$	$a(\varphi_1 + \varphi_2)$	$a(\varphi - \varphi_1 - \varphi_2)$
0	0,20	0,20	(12)	-0,342942	-0,343846	0,000904
0	0,20	0,25	(24)	-0,540852	-0,542156	0,001304
0	0,20	0,30	(12)	-0,639001	-0,640972	0,001971
0	0,25	0,25	(6)	-0,582520	-0,587592	0,005072
0,05	0,05	0,05	(8)	7,025240	7,025248	-0,000008
0,05	0,05	0,10	(24)	3,706142	3,706154	-0,000012
0,05	0,05	0,15	(24)	1,674425	1,674449	-0,000024
0,05	0,05	0,20	(24)	0,497997	0,498069	-0,000072
0,05	0,05	0,25	(24)	-0,196045	-0,195815	-0,000230
0,05	0,05	0,30	(24)	-0,606233	-0,605832	-0,000401
0,05	0,05	0,35	(24)	-0,842198	-0,841850	-0,000348
0,05	0,05	0,40	(24)	-0,969944	-0,970283	0,000339
0,05	0,05	0,45	(8)	-1,030835	-1,033521	0,002686
0,05	0,10	0,10	(24)	2,272009	2,272013	-0,000004
0,05	0,10	0,15	(48)	1,055994	1,055989	0,000005
0,05	0,10	0,20	(48)	0,218844	0,218877	-0,000033
0,05	0,10	0,25	(48)	-0,317299	-0,317102	-0,000197
0,05	0,10	0,30	(48)	-0,643709	-0,643175	-0,000534
0,05	0,10	0,35	(48)	-0,829971	-0,829152	-0,000819
0,05	0,10	0,40	(24)	-0,926735	-0,926646	-0,000089
0,05	0,15	0,15	(24)	0,409301	0,409221	0,000080
0,05	0,15	0,20	(48)	-0,104895	-0,105064	0,000169
0,05	0,15	0,25	(48)	-0,457838	-0,457515	-0,000323
0,05	0,15	0,30	(48)	-0,672251	-0,671769	-0,000482
0,05	0,15	0,35	(24)	-0,784066	-0,782032	-0,002034
0,05	0,20	0,20	(24)	-0,379814	-0,380428	0,000614
0,05	0,20	0,25	(48)	-0,564752	-0,565455	0,000703
0,05	0,20	0,30	(24)	-0,656169	-0,657104	0,000935
0,05	0,25	0,25	(12)	-0,604117	-0,607568	0,003451
0,10	0,10	0,10	(8)	1,443225	1,443233	-0,000008
0,10	0,10	0,15	(24)	0,626578	0,626595	-0,000017
0,10	0,10	0,20	(24)	0,003675	0,003705	-0,000080
0,10	0,10	0,25	(24)	-0,417788	-0,417495	-0,000293
0,10	0,10	0,30	(24)	-0,678921	-0,678247	-0,000674
0,10	0,10	0,35	(24)	-0,825460	-0,824738	-0,000722
0,10	0,10	0,40	(8)	-0,897493	-0,898937	0,001444
0,10	0,15	0,15	(24)	0,148005	0,148029	-0,000024
0,10	0,15	0,20	(48)	-0,252639	-0,252580	-0,000059
0,10	0,15	0,25	(48)	-0,535680	-0,534955	-0,000725

Продолжение.

$\frac{x}{a}$	$\frac{y}{a}$	$\frac{z}{a}$	Вес	$a\varphi$	$a(\varphi_1 + \varphi_2)$	$a(\varphi - \varphi_1 - \varphi_2)$
0,10	0,15	0,30	(48)	-0,707916	-0,707010	-0,000906
0,10	0,15	0,35	(24)	-0,794372	-0,792774	-0,001598
0,10	0,20	0,20	(24)	-0,475302	-0,475336	0,000034
0,10	0,20	0,25	(48)	-0,626380	-0,625851	-0,000529
0,10	0,20	0,30	(24)	-0,699253	-0,698208	-0,001045
0,10	0,25	0,25	(12)	-0,659998	-0,660204	0,000206
0,15	0,15	0,15	(8)	-0,161552	-0,161446	-0,000106
0,15	0,15	0,20	(24)	-0,433478	-0,433274	-0,000204
0,15	0,15	0,25	(24)	-0,628390	-0,627397	-0,000993
0,15	0,15	0,30	(24)	-0,741821	-0,740593	-0,001228
0,15	0,15	0,35	(8)	-0,788974	-0,787554	-0,001420
0,15	0,20	0,20	(24)	-0,593485	-0,593133	-0,000352
0,15	0,20	0,25	(48)	-0,700739	-0,700112	-0,000627
0,15	0,20	0,30	(24)	-0,746847	-0,745058	-0,001789
0,15	0,25	0,25	(12)	-0,727780	-0,726480	-0,001300
0,20	0,20	0,20	(8)	-0,696687	-0,696590	-0,000097
0,20	0,20	0,25	(24)	-0,759487	-0,759533	0,000046
0,20	0,20	0,30	(8)	-0,773590	-0,773062	-0,000528
0,20	0,25	0,25	(12)	-0,781607	-0,782646	0,001039
0,25	0,25	0,25	(2)	-0,801935	-0,808259	0,006324

образом продолжается к поверхности ячейки. Потенциальная энергия электрона в решетке равна, конечно, приведенному в табл. П4.1 значению с обратным знаком и возрастает до величины потенциального барьера при переходе от одной ячейки Вигнера — Зейтца к следующей. Из графика видно, что барьер минимален вдоль направления $[011]$ — направления к точке решетки, в которой расположен ближайший соседний атом. Этот барьер несколько выше вдоль направления $[111]$ и максимален вдоль направления $[001]$, вдоль которого располагаются атомы, наиболее близкие после ближайших соседей.

Вблизи начала координат потенциал, согласно фиг. П4.1, стремится к бесконечности, или потенциальная энергия электрона обращается в минус бесконечность. Этот результат является, конечно, следствием наличия точечного положительного заряда в узле решетки. Представляется разумным предположить, что мы смогли бы вывести аналитическое выражение для энергии по крайней мере в этой окрестности. На самом деле, проанализировав задачу несколько тщательнее, мы увидим, что

аналитическое выражение для ϕ можно получить для любых точек внутри ячейки Вигнера — Зейтца.

Потенциал ϕ внутри этой ячейки является, как мы отметили выше, решением уравнения Пуассона $\nabla^2\phi = -4\pi\rho$. Плотность заряда определяется совокупностью единичного точечного заряда в начале координат и однородного фона отрицательного заряда, плотность которого должна быть равна $-1/\Omega = -4/a^3$, чтобы полный отрицательный заряд внутри ячейки Вигнера — Зейтца, объем которой составляет $\Omega = a^3/4$, равнялся единичному отрицательному заряду. Но внутри ячейки Вигнера — Зейтца, а фактически и внутри сферы с радиусом, равным расстоянию до узла решетки с ближайшим соседним атомом, для которого

$$\frac{r}{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0,707,$$

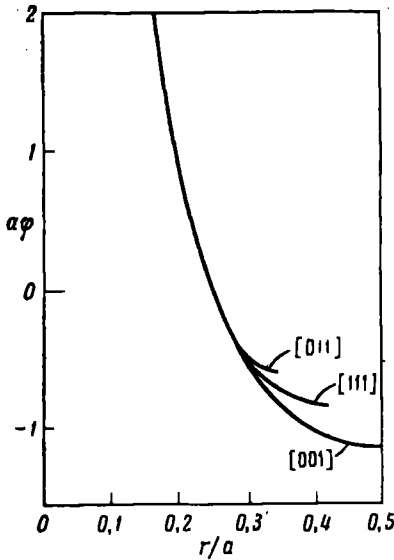
распределение заряда является сферически симметричным. Поэтому можно решить уравнение Пуассона в сферических координатах. Таким путем мы найдем частное решение дифференциального уравнения

$$\phi_1 = \frac{1}{r} + \frac{8\pi}{3a^3} r^2 + \text{const.} \quad (\text{П4.1})$$

Этот ответ можно сразу проверить, найдя лапласиан приведенного

выражения для ϕ ; он оказывается равным $4\pi(4/a^3)$, т. е. величине плотности объемного заряда с обратным знаком, умноженной на 4π , как и должно быть согласно уравнению Пуассона. Сингулярный член $1/r$ представляет собой, очевидно, потенциал точечного положительного заряда, расположенного в начале координат.

Далее, из теории неоднородных дифференциальных уравнений нам известно, что общее решение уравнения Пуассона должно равняться сумме частного решения, заданного выражением (П4.1), и общего решения однородного уравнения $\nabla^2\phi = 0$, т. е. уравнения Лапласа. Поскольку по симметрии задачи мы должны иметь функцию, обладающую симметрией Γ_1 , следует по-



Фиг. П4.1. Поведение потенциала вблизи начала координат вдоль направлений $[001]$, $[011]$ и $[111]$ в задаче Эвальда для гранцентрированной кубической решетки.

строить решения уравнения Лапласа в виде кубических гармоник; полиномов переменных x , y , z , имеющих указанный тип симметрии. Первые три члена получающегося в результате разложения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi_2 = \frac{1}{a} \left\{ A_4 \frac{r^4}{a^4} (l^4 + m^4 + n^4 - \frac{3}{5}) + \right. \\ + A_6 \frac{r^6}{a^6} \left[l^6 + m^6 + n^6 - \frac{15}{11} (l^4 + m^4 + n^4) + \frac{30}{77} \right] + \\ + A_8 \frac{r^8}{a^8} \left[l^8 + m^8 + n^8 - \frac{28}{15} (l^6 + m^6 + n^6) + \right. \\ \left. + \frac{14}{13} (l^4 + m^4 + n^4) - \frac{7}{39} \right] + \dots \left. \right\}. \quad (\text{П4.2}) \end{aligned}$$

Здесь r — расстояние от начала координат, а l , m , n — косинусы направляющих углов x/r , y/r , z/r соответственно.

Оказывается, что функцию, значения которой указаны в табл. П4.1, можно довольно точно аппроксимировать, считая полный потенциал равным $\Phi_1 + \Phi_2$ и используя только члены, приведенные в выражениях (П4.1) и (П4.2). Определив значение постоянной, мы найдем, что выражение (П4.1) должно иметь вид

$$\Phi_1 = \frac{1}{r} + \frac{8\pi}{3a^3} r^2 - 4,584850. \quad (\text{П4.3})$$

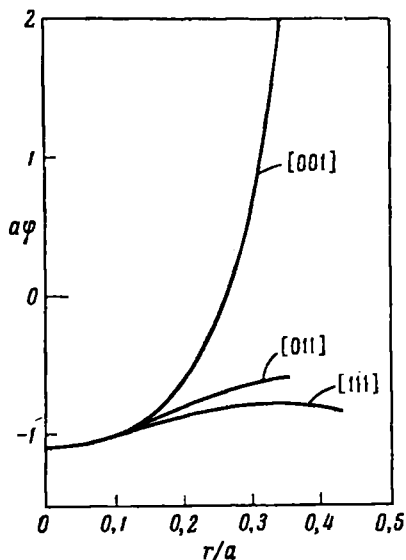
Коэффициенты A_4 , A_6 , A_8 следует определить по методу наименьших квадратов, выбирая их так, чтобы минимизировать сумму квадратов отклонений приближенных значений $\Phi_1 + \Phi_2$ от точных значений Φ . Эти коэффициенты оказываются следующими:

$$\begin{aligned} A_4 &= -18,687, \\ A_6 &= -1002,05, \\ A_8 &= 2326,1. \end{aligned} \quad (\text{П4.4})$$

При таких значениях параметров A разности между $\Phi_1 + \Phi_2$ и точными значениями Φ в большинстве случаев не превышают единицы в третьем знаке после запятой. Несколько большие отклонения имеют место вблизи поверхности ячейки Вигнера — Зейтца, где особенно существенны опущенные члены высшего порядка по r . Эти отклонения составляют приблизительно $\pm 0,005$ в точках $(x/a; y/a; z/a)$, равных $(0; 0; 0,50)$ и $(0; 0,25; 0,25)$; в первом случае величина $a(\Phi_1 + \Phi_2)$ равна $-1,084727$, тогда как $a\Phi = -1,089730$, а во втором случае $a(\Phi_1 + \Phi_2) = -0,587592$, тогда как $a\Phi = -0,582520$. Эти расхождения являются максимальными. Их можно было бы, конечно, устранить, используя большее число членов разложения (П4.2).

Если же попытаться взять меньше трех членов, содержащихся в выражении (П4.2), то мы не сможем получить удовлетворительного приближения.

Точка ($x/a=y/a=0$, $z/a=0,50$) отвечает полной кубической симметрии, подобно началу координат. Именно в этой точке рас-



Ф и г. П4.2. Поведение потенциала в окрестности точки $(0; 0; 0,50)$ вдоль линий, идущих из этой точки в направлениях $[001]$, $[011]$ и $[111]$, в случае гранецентрированной кубической решетки.

ние для φ_2 только с тремя членами фактически совершенно неудовлетворительно, за исключением точек в непосредственной окрестности от точки $r=0$. Причина кроется в том, что в данном случае меньше размеры области, в которой плотность заряда сферически симметрична. Действительно, при стремлении r к $a/2$ мы подходим к началу координат (прежде всего), в котором имеется сингулярность потенциала вследствие расположенного там точечного заряда, и разложение в ряд должно расходиться. Эта ситуация графически изображена на фиг. П4.2, где показан ход потенциала вблизи от точки $(0; 0; 0,50)$ в трех направлениях $[001]$, $[011]$ и $[111]$ от нее. Мы видим, что три кривые расходятся друг от друга при значительно меньших значениях r , чем на фиг. П4.1, что свидетельствует о существенно большей несферичности потенциала в данном случае.

полагался бы отрицательный ион в структуре хлористого натрия, если бы в начале координат был помещен положительный ион. Мы можем в таком случае найти разложение типа (П4.1) и (П4.3) в окрестности этой точки, так же как и в окрестности нулевой точки, с тем отличием, что член $1/r$, входящий в выражение (П4.1) (где теперь r — расстояние от точки, вблизи которой проводится разложение), будет отсутствовать, так как в задаче Эвальда в этой точке никакого точечного заряда нет. Однако, попытавшись выполнить подобное разложение, мы обнаружим, что сходимость приближений значительно хуже, чем при разложении вблизи начала координат. Коэффициенты A_4 , A_6 , A_8 в этом случае существенно больше, чем указанные в (П4.4), и разложе-

Метод Эвальда был первоначально разработан в связи с задачей Маделунга в теории ионных кристаллов. Как было отмечено выше, в кристалле со структурой хлористого натрия мы должны были бы иметь положительный ион в каждом узле гранецентрированной кубической решетки и отрицательный ион в каждой точке типа $(0; 0; 0,50)$. Если бы мы рассматривали эти ионы как точечные заряды, то нашли бы распределение потенциала всюду в кристалле, накладывая на решение, заданное табл. П4.1, другой потенциал, обратного знака и измененный таким образом, чтобы его сингулярность попадала в точку $(0; 0; 0,50)$ и была бы отрицательного знака. В этом случае два однородных распределения заряда взаимно уничтожились бы и остался бы просто потенциал, обусловленный положительными и отрицательными точечными зарядами.

При исследовании этой задачи Маделунг¹⁾ поставил следующий вопрос: какой вид имеет потенциал вблизи положительного иона в кристалле? Искомое выражение нетрудно получить на основе проведенного расчета. Очевидно, для решетки из одних только положительных зарядов потенциал вблизи начала координат описывается выражением для φ_1 [формула (П4.3)]. Это справедливо с точностью до членов порядка r^4 и выше, содержащихся в функции φ_2 [выражение (П4.2)]. С другой стороны, если добавить потенциал решетки из одних отрицательных точечных зарядов, то его значение в начале координат будет равно (с обратным знаком) величине, указанной в табл. П4.1 для точки $(0; 0; 0,50)$, т. е., как видно из таблицы, равно $-1,089730$. Мы установили, что потенциал в окрестности этой точки можно представить в виде суммы функций φ_1 (без члена с $1/r$) и φ_2 . Фактически потенциал решетки отрицательных зарядов, помещенных в точках типа $(0; 0; 0,50)$, вблизи начала координат можно разложить следующим образом:

$$\varphi_3 = -\frac{8\pi}{3a^3}r^2 + 1,089730 + \text{Члены порядка } r^4 \dots \quad (\text{П4.5})$$

Поэтому потенциал вблизи положительного иона в структуре NaCl будет иметь вид

$$\begin{aligned} \varphi_1 + \varphi_3 &= \frac{1}{r} - 4,584850 + 1,089730 + \text{Члены порядка } r^4 + \dots = \\ &= \frac{1}{r} - 3,495120 + \text{Члены порядка } r^4 + \dots \quad (\text{П4.6}) \end{aligned}$$

Постоянная Маделунга оказывается в этом случае равной 3,495120, что согласуется в пределах ошибок данного расчета с более точным значением 3,495129, указанным в гл. 9, § 3.

1) F. Madelung Phys. Zs. 19, 524 (1918)

Обратимся теперь к расчету, приводящему к выражению (4.45) для поправки Лорентца. В формуле (4.37) мы привели выражение для вектора Герца, обусловленного диполями с величиной дипольного момента \mathbf{M} , расположенными в узлах решетки Бравэ. Нас интересовала сумма всех членов в этом выражении, за исключением постоянного, в предельном случае длинных волн, когда величины ω/c и $\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i$ были очень малы по сравнению с абсолютной величиной любого из векторов \mathbf{K}_h обратной решетки. Если обозначить искомую величину через \mathbf{Z}' , то из формулы (4.37) найдем, что она определяется выражением

$$\mathbf{Z}' = \sum_{\mathbf{K}_h \neq 0} \frac{\mathbf{M}}{\epsilon_0 \Omega} \frac{\exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\} \exp(-i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r})}{|\mathbf{K}_h|^2}, \quad (\text{П4.7})$$

при выводе которого мы пренебрегли величинами ω/c , \mathbf{k}_r и \mathbf{k}_i в знаменателе формулы (4.37). Указанная сумма по своему характеру очень близка к сумме, входящей в выражение (9.17), которую мы вычислили в гл. 9, § 4, и в настоящем приложении. Сомножитель

$$\frac{\mathbf{M}}{\epsilon_0 \Omega} \exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\}$$

можно вынести из-под знака суммирования в выражении (П4.7). Обозначив величину, определяемую выражением (9.17), как и в этом выражении, через φ , получим

$$\mathbf{Z}' = \frac{\mathbf{M}}{4\pi\epsilon_0} \exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\} \varphi. \quad (\text{П4.8})$$

Но мы показали [см. формулу (П4.3)], что потенциал φ с точностью до членов порядка r^4 равен φ_1 . Для настоящих целей нам нужны лишь два первых члена этого выражения, и мы находим

$$\mathbf{Z}' = \frac{\mathbf{M}}{4\pi\epsilon_0} \exp\{i[\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}]\} \left(\frac{1}{r} + \frac{8\pi}{3a^3} r^2 + \text{const} \right). \quad (\text{П4.9})$$

Первый член выражения (П4.9), пропорциональный $1/r$, описывает вектор Герца, обусловленный диполем, расположенным в начале координат, а остальные члены характеризуют вектор Герца, который определяется более удаленными диполями. Величина, которую мы хотим вычислить в формуле (4.45), не содержит вклада от диполя в начале координат, поэтому она получается из члена, пропорционального r^2 , в выражении (П4.9).

Вычислим теперь величину электрического поля, обусловленного этим вторым членом. Учитывая, что в случае гранецентрированной кубической решетки, для которой проводится дан-

ные расчеты, мы имеем $\Omega = a^3/4$, интересующий нас член можно записать в виде

$$\mathbf{Z}'' = \frac{\mathbf{M}}{6\epsilon_0\Omega} \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}] \} r^2. \quad (\text{П4.10})$$

Эта величина представляет собой вектор Герца, направленный параллельно оси z , так что \mathbf{Z}'' есть величина z -компоненты вектора. Чтобы найти электрическое поле, используем уравнение (4.23), которое можно переписать как

$$\mathbf{E}'' = \text{rot rot } \mathbf{Z}'' + \nabla^2 \mathbf{Z}'' - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}''}{\partial t^2} = \text{grad div } \mathbf{Z}'' - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}''}{\partial t^2}. \quad (\text{П4.11})$$

Нетрудно показать, что член с производной по времени и члены с производными по пространственным координатам, возникающие при дифференцировании экспоненты, входящей в выражение (П4.10), малы по сравнению с главным членом, появляющимся при дифференцировании r^2 , будучи пропорциональны различным степеням отношения r/λ , где λ — длина волны света. Поскольку мы имеем дело со значениями r , чрезвычайно малыми по сравнению с длиной волны, указанными членами можно пренебречь. Получим

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{Z}'' &= \frac{\mathbf{M}}{6\epsilon_0\Omega} \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}] \} \frac{\partial (r^2)}{\partial z} = \\ &= \frac{\mathbf{M}}{3\epsilon_0\Omega} \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}] \} z, \quad (\text{П4.12}) \\ \text{grad div } \mathbf{Z}'' &= \mathbf{E}'' = \frac{\mathbf{M}}{3\epsilon_0\Omega} \exp \{i [\omega t - (\mathbf{k}_r + i\mathbf{k}_i) \cdot \mathbf{r}] \}, \end{aligned}$$

что, как и требовалось доказать, находится в согласии с выражением (4.45).

5. ПОЛЯРИЗАЦИЯ И ПРИТЯЖЕНИЕ ВАН ДЕР ВААЛЬСА

§ 1. Введение

Силы взаимодействия между атомами или ионами, которые мы рассмотрели в [1] в связи с задачей об образовании молекул и в гл. 9 и 10 настоящей книги в связи с вопросом о силах сцепления твердых тел, определяются электростатическим взаимодействием ионов, или перекрытием облаков заряда двух атомов. Атом, находящийся в S -состоянии, сферически симметричен, и если он не заряжен, то создаваемое им электростатическое поле равно нулю в точках вне области электронного заряда. Поэтому в такой задаче, как проблема молекулы водорода, образованной из двух атомов в S -состояниях, определяющим фактором при рассмотрении взаимодействия двух нейтральных атомов является перекрытие их электронных оболочек. При расчетах как по методу Гайтлера — Лондона, так и с помощью простого метода конфигурационного взаимодействия мы получаем силы притяжения и отталкивания, пропорциональные экспоненциально убывающим функциям межъядерного расстояния R , причем появление экспонент обусловлено самим распределением плотности заряда. Однако существует ряд взаимодействий другого типа, более медленно спадающих с увеличением расстояния. В настоящем приложении будет рассмотрен вопрос о подобных взаимодействиях, который мы, вероятно, опустили бы в более традиционном изложении. Притяжение Ван дер Ваальса является одним из таких взаимодействий; мы увидим ниже, что соответствующая ему энергия взаимодействия убывает с расстоянием как $1/R^6$ при больших R . Все эффекты, о которых мы говорим, имеют электростатическое происхождение, и большинство из них обусловлено поляризацией, возникающей в атомах под влиянием других атомов, ионов или молекул. Поэтому при рассмотрении необходимо учитывать не только внутренние силы, но также и эффекты поляризации, или, в более широком понимании, действие внешнего электрического поля на атом.

Большую часть приведенных ниже рассуждений можно столь же просто применить и к более сложным случаям, чем те, которые мы подробно рассмотрим. Так, например, опишем в

общих чертах метод трактовки вопросов о поляризуемости, о связанном с ней явлении диэлектрического экранирования и о притяжении Ван дер Ваальса. При переходе к частным приложениям мы, однако, ограничимся двумя случаями, которые будут рассмотрены довольно подробно, — это взаимодействия между атомами водорода и между атомами гелия. Поскольку эти задачи были рассмотрены в книге [1] и при этом не было обнаружено никаких доказательств наличия притяжения Ван дер Ваальса, очевидно, что в указанном расчете что-то было упущено. Наша первая задача — простым и наглядным образом выяснить, какая именно характерная особенность не была учтена; оказывается, такой особенностью является поляризация, которую следует рассмотреть во втором порядке теории возмущений или иным эквивалентным способом.

Очевидно, что два противоположно заряженных иона будут притягиваться друг к другу, причем энергия этого притяжения обратно пропорциональна R . Взаимодействие такого типа имеет место в ионных молекулах и кристаллах, таких, как щелочно-галогидные. Но верно также и то, что ион вследствие поляризации будет притягивать любой нейтральный атом или молекулу, и этот эффект будет первым случаем, который мы рассмотрим. Он аналогичен (на уровне атомных масштабов) тому, что наблюдается в известном опыте, когда заряженный предмет притягивает легкие незаряженные предметы типа бузиновых шариков. Механизм этого явления состоит в следующем. Если на расстоянии R от нейтрального объекта имеется ион с зарядом Ze , то в точке расположения рассматриваемого объекта будет действовать электрическое поле величиной $Ze/4\pi\epsilon_0 R^2$, создаваемое зарядом иона. Если данный объект способен поляризоваться, а такими являются все реальные объекты, то в результате наличия поля он приобретет электрический дипольный момент. Величина дипольного момента будет равна произведению напряженности поля на некоторый коэффициент α , по определению представляющий собой поляризуемость. Таким образом, этот наведенный дипольный момент будет равен $\alpha Ze/4\pi\epsilon_0 R^2$. Диполь в свою очередь приведет к возникновению электрического поля в точке расположения иона. Величина этого электрического поля будет равна произведению дипольного момента на $2/4\pi\epsilon_0 R^3$, что составляет $2\alpha Ze/(4\pi\epsilon_0)^2 R^5$, а величина соответствующего электрического потенциала есть $\alpha Ze/2(4\pi\epsilon_0)^2 R^4$. Знак его будет отвечать притяжению между ионом и рассматриваемым поляризованным объектом. Таким образом, если заряд иона положителен, то отрицательно заряженный конец наведенного диполя будет указывать на ион, и поэтому положительно заряженный ион будет сильнее притягиваться этим отрицательным

концом диполя, чем отталкиваться его отрицательным концом, т. е. он будет в конечном счете притягиваться. Энергия притяжения между ионом и возникшим в результате поляризации диполем в таком случае равна

$$\text{Притяжение между ионом и поляризационным диполем} = - \frac{\alpha Z^2 e^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 R^4}. \quad (\text{П5.1})$$

В молекуле, образованной из положительного и отрицательного ионов, будут, следовательно, иметься, помимо первичного кулоновского притяжения между ионами, пропорционального $1/R$, еще члены вида (П5.1), дающие притяжение. Каждый ион будет поляризовать другой, поэтому мы добавим два члена, подобных (П5.1), по одному для каждого поляризуемого иона.

Рассмотрим теперь нейтральную молекулу, обладающую постоянным дипольным моментом, и выясним, как она поляризует другие объекты. Такой молекулой могла бы служить, например, молекула NaCl, которую можно считать в первом грубом приближении составленной из ионов Na^+ и Cl^- . Пусть ее дипольный момент будет равен по величине μ , тогда на расстоянии R он создаст электрическое поле, величина которого будет равна произведению $2\mu/4\pi\epsilon_0 R^3$ на функцию угла между осью диполя и направлением на объект. Под действием этого поля объект будет поляризоваться, приобретая дипольный момент, пропорциональный величине $2\alpha\mu/4\pi\epsilon_0 R^3$. Такой индуцированный диполь создаст электрическое поле; в точке расположения первого диполя оно будет пропорционально $4\alpha\mu^2/(4\pi\epsilon_0)^2 R^6$. Появится энергия взаимодействия между первым диполем и возникшим полем, равная произведению дипольного момента первого диполя на величину напряженности электрического поля и на косинус угла между направлениями дипольного момента и поля. Таким образом, с точностью до функции, зависящей от угловых переменных, энергия будет пропорциональна величине $4\alpha\mu^2/(4\pi\epsilon_0)^2 R^6$. Остается не очень сложная задача усреднения по различным ориентациям, с тем чтобы найти среднюю потенциальную энергию; оказывается, что она, как и прежде, соответствует притяжению и равна величине $-4\alpha\mu^2/(4\pi\epsilon_0)^2 R^6$, умноженной на некоторое число.

Одиночный атом, находящийся в S -состоянии, не имеет дипольного момента и поэтому не в состоянии действовать на другой атом точно описанным выше образом. Однако сказанное справедливо только для среднего значения дипольного момента, т. е. для среднего по волновой функции от суммы величин e_x , e_y , e_z для всех электронов атома. В каждой частной конфигурации, когда каждый электрон находится в некоторой фиксированной

точке пространства, будет отлично от нуля отвечающее этой конфигурации значение дипольного момента, который может вызвать поляризацию другого атома именно так, как было описано выше. Эта поляризация приведет к возникновению поля, которое в свою очередь будет воздействовать на исходный диполь, и в результате появится потенциальная энергия, пропорциональная, как мы установили выше, величине $-4\alpha\mu^2/(4\pi\epsilon_0)^2R^6$. Именно эту величину мы должны теперь усреднить по волновой функции. При этом усредняется уже величина μ^2 , пропорциональная x^2 , или y^2 , или z^2 , что с необходимостью приведет к отличному от нуля результату, поскольку подинтегральное выражение всегда положительно. Поэтому и в данном случае мы получим притяжение, не равное нулю; соответствующая величина энергии равна

$$\text{Энергия притяжения} = -\text{const} \frac{4\alpha(\mu^2)_{\text{ср}}}{(4\pi\epsilon_0)^2R^6}. \quad (\text{П5.2})$$

Притяжение такого типа должно иметь место для произвольной пары атомов, и оно дает обычную силу Ван дер Ваальса.

Найденное выражение является лишь первым членом ряда по обратным степеням R . Атом будет иметь не только мгновенное, отвечающее данной конфигурации электронов значение дипольного момента, но также и мгновенное значение квадрупольного момента и прочих моментов высшего порядка. Каждый из них будет порождать поле в точке расположения соседнего атома, поляризовать его, и возникающий при этом диполь будет действовать в обратном направлении на мультиполь. Таким путем можно найти добавочные члены порядка R^{-8} и т. д., которые существенны на несколько меньших расстояниях, чем те, на которых становится заметным притяжение (П5.2). Разложение такого типа по обратным степеням расстояния справедливо лишь тогда, когда области распределения заряда не перекрываются, т. е. на расстояниях, превышающих те, для которых мы приводили расчеты в книге [1]. Для меньших расстояний следует использовать иные методы математической трактовки. Ни в каком смысле не верно, что притяжение Ван дер Ваальса обращается в бесконечность при стремлении R к нулю, как могло бы показаться на основании формулы (П5.2). Напротив, оказывается, что, например, для двух атомов гелия силы Ван дер Ваальса приводят к наличию минимума потенциала в области достаточно больших значений R , а на меньших расстояниях преобладает отталкивание, рассмотренное в [1] (см. гл. 6, § 4 этой книги), и когда отталкивание становится достаточно сильным, силы притяжения Ван дер Ваальса оказываются пренебрежимо малыми по сравнению с силами отталкивания,

и расчеты, подобные выполненным в [1], будут справедливы для этой области меньших значений R .

Из этого качественного рассуждения видно, что для понимания сил притяжения Ван дер Ваальса нужно выяснить вопрос о поляризуемости атомов. Поэтому рассмотрим в первую очередь последнюю задачу. Мы увидим, что методы, используемые здесь, нетрудно обобщить таким образом, чтобы обсудить также и силы Ван дер Ваальса. Имеются два различных метода, применявшихся при рассмотрении обеих указанных задач: один, основанный на теории возмущений, и другой, в основе которого лежат вариационные методы. Мы обсудим оба эти подхода, начав с того, который опирается на использование теории возмущений. Этим методом удобно получить общее представление о характере задачи, тогда как для численных расчетов более полезен вариационный метод. В случае атома водорода в состоянии $1s$ мы сможем, кроме того, получить точное решение задачи о поляризуемости. Найдем его, получив при этом ценную информацию, которой будем руководствоваться при построении решения вариационным путем.

§ 2. Расчет поляризуемости методом теории возмущений

Пусть атом помещен во внешнее электрическое поле E , направленное вдоль оси z ; ядро находится в начале координат. Будем считать, что мы нашли точное решение уравнения Шредингера для изолированного атома. Гамильтониан состоит из кинетической энергии всех электронов, их потенциальной энергии в поле ядра, энергии взаимного кулоновского отталкивания электронов и их потенциальной энергии во внешнем поле. Все эти члены, за исключением последнего, такие же, как и для изолированного атома, и их можно объединить в выражение $(H^0)_{\text{оп}}$. Потенциальную энергию во внешнем поле обозначим через $(H^1)_{\text{оп}}$. Выражение для нее написать очень просто. Потенциальная энергия во внешнем поле электрона, координата которого z , равна величине eEz , т. е. произведению заряда электрона $-e$ и электростатического потенциала $-Ez$. Поэтому член возмущения в гамильтониане имеет вид

$$(H^1)_{\text{оп}} = \sum_i eEz_i, \quad (\text{П5.3})$$

где суммирование проводится по всем электронам. Эту величину можно выразить через дипольный момент атома, который

по определению является вектором с компонентами

$$\begin{aligned}(M_x)_{\text{оп}} &= -e \sum_i x_i, \\ (M_y)_{\text{оп}} &= -e \sum_i y_i, \\ (M_z)_{\text{оп}} &= -e \sum_i z_i.\end{aligned}\tag{П5.4}$$

Таким образом, дипольный момент представляет собой сумму произведений зарядов электронов на их смещения по отношению к ядру. Итак, мы имеем

$$(H^1)_{\text{оп}} = -E(M_z)_{\text{оп}} = -\mathbf{E} \cdot (\mathbf{M})_{\text{оп}},\tag{П5.5}$$

где \mathbf{E} — вектор напряженности поля и $(\mathbf{M})_{\text{оп}}$ — вектор дипольного момента.

Если бы мы могли точно решить уравнение Шредингера при наличии внешнего поля, то обнаружилось бы, что появится средний индуцированный дипольный момент, пропорциональный E в слабых электрических полях, но эта линейная связь уже не имеет места в сильных полях. Разложим дипольный момент в ряд по степеням поля E . Поляризуемость определяется как коэффициент α в этом разложении для среднего дипольного момента, которое имеет вид $\alpha E +$ члены высшего порядка. Мы получили бы также, что средняя энергия содержит член порядка E^2 , равный $-\alpha E^2/2$, и члены более высокого порядка. Для слабых полей, с которыми обычно имеют дело, достаточно ограничиться членами порядка E в разложении для дипольного момента и порядка E^2 для энергии. Но, как известно, используя теорию возмущений, очень легко найти во втором порядке выражение для энергии, правильное с точностью до членов, квадратичных по возмущению, включительно, а также возмущенную волновую функцию с точностью до членов, линейных по возмущению. Это как раз то, что нам нужно в данном случае. Иначе говоря, расчет во втором порядке теории возмущений, если мы сможем провести его строго, даст нам результаты, необходимые для того, чтобы найти поляризуемость атома. Высшие приближения метода теории возмущений были бы нужны только в том случае, если бы нам потребовалось найти члены высшего порядка в разложениях по степеням интенсивности электрического поля.

Обратимся теперь к формальному построению теории возмущений до второго порядка применительно к нашей задаче. Нас обычно интересует отыскание поляризуемости атома, находящегося в основном состоянии, и единственный случай,

который мы рассмотрим, будет относиться к простой ситуации, когда это основное состояние является S -состоянием. Этого достаточно для атомов водорода и гелия, равно как и для атома любого инертного газа в основном состоянии; данные методы могут быть использованы также в случае молекул с заполненными электронными оболочками.

Как мы помним, применяя теорию возмущений, в качестве первого шага нужно найти матричные элементы гамильтониана по невозмущенным волновым функциям. Рассмотрим невозмущенное уравнение Шредингера

$$(H^0)_{оп} u_n^0 = E_n^0 u_n^0.$$

Здесь u_n^0 — его решение, соответствующее совокупности квантовых чисел, которую мы символически обозначили через n , и отвечающее невозмущенной энергии E_n^0 . Пусть для основного состояния $n=1$. Тогда нужно найти матричные элементы оператора (П5.5), связывающие это основное состояние со всевозможными возбужденными состояниями. Очевидно, матричный элемент возмущения, связывающий основное и n -е возбужденное состояния, будет равен

$$H_{1n}^1 = -E(M_z)_{1n}, \quad (\text{П5.6})$$

где $(M_z)_{1n}$ — соответствующий матричный элемент z -компоненты дипольного момента. Эти матричные элементы совпадают с теми, с которыми мы имеем дело при нахождении вероятностей оптических переходов между основным и n -м возбужденным состояниями, и, согласно правилам отбора для оптических переходов, эти величины будут равны нулю для всякого запрещенного перехода. В данном случае вследствие правила отбора по орбитальному квантовому числу L будут отличны от нуля матричные элементы только для переходов из основного состояния, которое по предположению является S -состоянием, в возбужденные P -состояния.

Из расчетов, проделанных при исследовании оптических переходов, нам известны следующие свойства матричных элементов: диагональные матричные элементы оператора $(M_z)_{оп}$ равны нулю, поэтому в выражении для средней энергии, зависящей от внешнего поля, отсутствует член первого порядка; первым неисчезающим членом оказывается член второго порядка. Кроме того, поскольку мы предположили, что наши невозмущенные функции являются точными решениями задачи для изолированного атома, отсутствуют также недиагональные матричные элементы оператора H^0 , что позволило нам исполь-

зывать только оператор $(H^1)_{оп}$ при определении недиагональных матричных элементов в (П5.6).

Теперь воспользуемся обычными методами теории возмущений с тем, чтобы найти во втором порядке энергию и средний дипольный момент. Получим

$$\text{Энергия} = E_1^0 + \sum_n \frac{|(M_z)_{1n}|^2}{E_1^0 - E_n^0} E^2 + \dots \quad (\text{П5.7})$$

Возмущенная волновая функция будет иметь вид

$$u = u_1^0 + \sum_n \frac{(M_z)_{n1} u_n^0}{E_1^0 - E_n^0} (-E) + \dots \quad (\text{П5.8})$$

Определяя среднее значение оператора дипольного момента (П5.3) в состоянии с волновой функцией (П5.8), получаем отличные от нуля вклады, линейные по E , от перекрестных членов, содержащих u_1^0 и u_n^0 , из выражения (П5.8). Поэтому будем иметь

$$(M_z)_{ср} = -2E \sum_n \frac{|(M_z)_{1n}|^2}{E_1^0 - E_n^0} + \dots \quad (\text{П5.9})$$

Поскольку эта величина должна равняться αE , находим

$$\alpha = 2 \sum_n \frac{|(M_z)_{1n}|^2}{E_n^0 - E_1^0}. \quad (\text{П5.10})$$

В последнем выражении мы поменяли местами E_1^0 и E_n^0 , так как по предположению величина E_1^0 есть энергия основного состояния, так что она меньше, чем E_n^0 . Таким образом, выражение (П5.10) показывает, что член, пропорциональный E^2 в выражении для энергии (П5.7), есть $-\alpha E^2/2$, как и должно быть согласно сделанному выше утверждению.

Теперь видно, что при известных энергиях E_n^0 возбужденных состояний и матричных элементах $(M_z)_{1n}$ оператора электрического дипольного момента для переходов между основным и всеми возбужденными состояниями мы, выполнив суммирование, в состоянии строго вычислить поляризуемость. Это можно проделать в случае атома водорода, для которого матричные элементы известны; однако в следующем параграфе мы продемонстрируем значительно более простой метод решения, пригодный в указанном случае. При выполнении суммирования следует помнить, что набор возбужденных состояний включает не только состояния, отвечающие дискретным уровням, но

также и состояния непрерывного спектра и что часть суммы, соответствующую непрерывному спектру, можно преобразовать в интеграл. Расчеты, проведенные описанным выше методом, представляют собой просто численное суммирование с использованием численных приближений при интегрировании по непрерывному спектру; по-видимому, невозможно представить сумму в замкнутой аналитической форме или каким-либо иным способом упростить процесс вычислений. Поэтому данный метод определения поляризуемости, хотя и является прямым, оказывается не очень удобным для численных расчетов.

Проведенное рассмотрение на основе теории возмущений является, однако, весьма важным с определенной точки зрения, а именно в связи с дисперсионной теорией. Хорошо известная дисперсионная теория Крамерса — Гейзенберга (см., например, [2]) дает выражение для индуцированного дипольного момента атома не только при наложении статического электрического поля, но также и в поле, синусоидально изменяющемся со временем. Пусть частота внешнего поля есть ν , тогда для поляризуемости находим

$$\alpha = 2 \sum_n \frac{|(M_z)_{1n}|^2 \hbar \nu_{n1}}{(\hbar \nu_{n1})^2 - (\hbar \nu)^2}, \quad (\text{П5.11})$$

где $\hbar \nu_{n1} = E_n^0 - E_1^0$; эта формула выведена в предположении о том, что атом находится в основном состоянии. Полученное выражение сводится к (П5.10) в случае нулевой частоты приложенного поля, но с увеличением частоты поляризуемость изменяется, обращаясь в бесконечность, когда ν равняется какой-либо из частот ν_{n1} собственного поглощения атома. Это явление называют аномальной дисперсией. В реальных условиях будет иметь место поглощение, не принятое во внимание при выводе выражения (П5.11), и учет его приведет, кроме фактического введения поглощения, к тому, что величина поляризуемости будет оставаться конечной вблизи линий поглощения.

Итак, мы видим, что каждый член в выражении (П5.10) для поляризуемости имеет физический смысл, представляя собой предельное значение поляризуемости при нулевой частоте, отвечающей одной из линий спектра поглощения. Имеется также важная теорема, так называемое правило сумм Куна — Томаса (см. [2]), которая дает нам важную информацию о величине матричных элементов $(M_z)_{1n}$. Эту теорему удобнее сформулировать, переписав выражение (П5.11) в следующем виде:

$$\alpha = \sum_n \frac{e^2}{4\pi^2 m} \frac{f_{n1}}{\nu_{n1}^2 - \nu^2}, \quad (\text{П5.12})$$

где $-e$ и m — заряд и масса электрона и

$$f_{n1} = \frac{8\pi^2 m \nu_{n1} |(M_z)_{1n}|^2}{e^2 h}. \quad (\text{П5.13})$$

Величины f_{n1} называются силами осцилляторов; эти величины безразмерны. Их немаловажная роль определяется тем, что, как можно доказать, имеет место равенство

$$\sum_n f_{n1} = N, \quad (\text{П5.14})$$

где N — полное число электронов в атоме. В случае атома водорода $N=1$. Используя легко проверяемое соотношение

$$\frac{e^2 h^2}{4\pi^2 m} = 4(4\pi\epsilon_0) a_0^3 R_y^2, \quad (\text{П5.15})$$

где a_0 — борковский радиус, R_y — единица частоты *ридберг*, мы можем переписать формулу (П5.12) в виде

$$\alpha = \sum_n 4(4\pi\epsilon_0) a_0^3 \frac{f_{n1}}{(h\nu_{n1}/R_y)^2 - (h\nu/R_y)^2}. \quad (\text{П5.16})$$

Иначе говоря, если измерять частоты в ридбергах, то поляризуемость α выглядит как произведение величины $(4\pi\epsilon_0) a_0^3$ на безразмерную постоянную или (в гауссовой системе, в которой величина $4\pi\epsilon_0$ принимается равной единице) как произведение a_0^3 на безразмерную постоянную.

В случае атома водорода силы осцилляторов f_{n1} известны, и суммирование в выражении (П5.16) можно выполнить до конца. Переходы из основного состояния $1s$ разрешены только в p -состояния, и мы можем понимать под n главное квантовое число рассматриваемого p -состояния. Тогда на основании формулы (П5.16) поляризуемость атома водорода в статическом поле есть

$$\alpha = 4(4\pi\epsilon_0) a_0^3 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f_{n1}}{(1-1/n^2)^2} + \text{Вклад от непрерывного спектра}. \quad (\text{П5.17})$$

Значения f_{n1} для дискретных состояний были подсчитаны Сугиурой в работе [3]. Было найдено, что

$$f_{n1} = \frac{2^8}{3} \frac{n^5 (n-1)^{2n-4}}{(n+1)^{2n+4}}. \quad (\text{П5.18})$$

Что касается вклада от непрерывного спектра, Сугиура приводит результат для величины интеграла от \hat{f} для переходов из основного состояния в возбужденные состояния, энергии которых лежат между E и $E+dE$ (где значение $E=0$ отвечает точке

сгущения уровней дискретного спектра). Несколько более простая и почти столь же точная формула была получена Эйзеншитцем и Лондоном [4]; согласно их результату, интеграл от f по интервалу энергий шириной dE равен произведению dE на величину

$$\frac{df}{dE} = \frac{2^7}{3} \frac{1}{(1+E)^4} e^{-4} \left(1 + \frac{4}{3} E\right). \quad (\text{П5.19})$$

Мы можем теперь использовать приведенные результаты, чтобы вычислить значение поляризуемости, определяемое выражением (П5.17), в случае атома водорода. В табл. П5.1 указаны значения f_{n1} , рассчитанные по формуле Сугиуры (П5.18), а также

Таблица П5.1

Расчет поляризуемости водорода
по данным о силах осцилляторов

n	f_{n1}	$\frac{f_{n1}}{(1-1/n^2)^2}$
2	0,4162	0,7399
3	0,0791	0,0990
4	0,0290	0,0330
5	0,0139	0,0150
6	0,0078	0,0082
7	0,0048	0,0050
8	0,0032	0,0033
9	0,0022	0,0022
10— ∞	0,0079	0,0079
Непрерывный спектр	0,4342	0,02084
Сумма	0,9983	1,1219

Примечание. Отклонения величин сумм от значений 1,0000 и 1,1250 соответственно обусловлены отчасти тем, что недостаточно точны указанные данные для дискретных состояний, а отчасти тем, что формула (П5.19) для непрерывного спектра является только приближенной.

эти значения, деленные на $(1-1/n^2)^2$, и результаты суммирования. Приведены также результаты интегрирования для непрерывного спектра, найденные на основе формулы (П5.19). Результаты суммирования величин f указаны для проверки выполнения правила сумм, а значения величин $f/(1-1/n^2)^2$ и $f/(1+E)^2$ нужны при вычислении поляризуемости. Интегрирование по непрерывному спектру с использованием формулы (П5.19) проводятся элементарно.

Из табл. П5.1 видно, что сумма в формуле (П5.17) приблизительно равна 1,125, что дает для поляризуемости водорода в основном состоянии величину, примерно равную $4,50(4\pi\epsilon_0)a_0^3$. В следующем параграфе, где мы найдем строгое решение рассматриваемой задачи, будет доказано, что это значение является совершенно точным. Отметим, что мы могли бы определить среднее значение разности энергий основного состояния и возбужденных состояний, используя значения f_{n1} в качестве весовых множителей при усреднении величин $1/(h\nu_{n1}/Ry)^2$. Иначе говоря, мы могли бы определить следующую величину:

$$\frac{1}{(h\nu/Ry)_{\text{cp}}^2} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f_{n1}}{(1-1/n^2)^2} + \int_0^{\infty} \frac{df/dE}{(1+E)^2} dE. \quad (\text{П5.20})$$

Проделав это, мы нашли бы, что

$$\left(\frac{h\nu}{Ry}\right)_{\text{cp}} = (1,125)^{-1/2} = 0,9428. \quad (\text{П5.21})$$

Иными словами, поляризуемость атома водорода такова, какую мы получили бы, если бы в спектре была только одна линия поглощения на частоте 0,9428 *ридберг* и соответствующая сила осциллятора была бы равна единице. Мы увидим, что этот прием, который состоит в замене указанным способом фактического спектра частот поглощения некоторыми средними характеристиками, оказывается довольно ценным при получении качественных оценок не только поляризуемостей, но также и сил Ван дер Ваальса.

§ 3. Точное значение поляризуемости водорода

Мы утверждали, что в случае атома водорода в основном состоянии можно точно определить поляризуемость. В настоящем параграфе будет показано, как это сделать¹⁾. Заметим прежде всего, что, как следует из выражения (П5.8), возмущенная волновая функция должна равняться сумме невозмущенной волновой функции и линейной комбинации волновых функций u_n^0 всех тех возбужденных состояний, для которых недиагональные матричные элементы дипольного момента, связывающие их с основным состоянием, отличны от нуля. Мы видели, что если основное состояние является S-состоянием, то это означает, что в такую сумму будут входить только волновые функции P-типа. Каждая из них зависит от угловых переменных

¹⁾ См. работу Уоллера [5], который решил задачу в параболических координатах.

одинаковым образом. Фактически оказывается, что только для волновых функций P -типа с $M_L=0$ имеются отличные от нуля компоненты матрицы $(M_z)_{оп}$ и эти функции зависят от углов через множитель $\cos \theta$. Отсюда видно, что в данном случае второй член в выражении (П5.8) должен зависеть от углов таким же образом, а поскольку, помимо угловых переменных, функция должна зависеть еще только от r , то она должна иметь вид произведения $\cos \theta$ на функцию r . Таким образом, наша задача состоит в вычислении этой функции r . Ее вид оказывается простым и может быть определен строго, что дает нам возможность точно вычислить значение суммы в выражении (П5.8).

Мы проведем расчет не только для атома водорода, но и для произвольного иона с атомным номером Z , содержащего лишь один электрон. Тогда невозмущенная $1s$ -функция есть $u_0^0 = \sqrt{Z^3/\pi} e^{-Zr}$. Представляется разумным предположить, что искомая функция r , которая должна описывать второй член в выражении (П5.8), также будет содержать в качестве множителя эту экспоненту, поскольку наша функция обязательно быстро стремится к нулю с увеличением r . Запишем, следовательно, второй член в (П5.8) в виде $\sqrt{Z^3/\pi} e^{-Zr} v(r) \cos \theta$, где функцию $v(r)$ следует определить. Мы хотим, чтобы функция

$$u = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr} [1 + v(r) \cos \theta] \quad (\text{П5.22})$$

представляла собой решение уравнения Шредингера для возмущенной системы, справедливое с точностью до членов первого порядка по малым величинам или до членов, пропорциональных внешнему полю.

Выпишем теперь это уравнение Шредингера. Выберем ось z в качестве полярной оси сферических координат. Тогда будем иметь

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + eEr \cos \theta \right) u = (-Z^2 Ry + \mathcal{E}) u. \quad (\text{П5.23})$$

Здесь первые два члена в левой части представляют собой оператор Гамильтона невозмущенного атома, $eEr \cos \theta$ — гамильтониан возмущения, согласно формуле (П5.3), а в правой части мы записали собственное значение как сумму соответствующей величины для невозмущенной задачи, равной $-Z^2$ ридберг, и поправочного члена \mathcal{E} . Далее мы будем выражать энергию в ридбергах и расстояния в единицах боровского радиуса, а в качестве единицы измерения поля E возьмем величину рид-

берг/ ϵa_0 . При таком выборе единиц уравнение (П5.23) принимает вид

$$\left(-\nabla^2 - \frac{2Z}{r} + Er \cos \theta\right) u = (-Z^2 + \mathcal{E}) u, \quad (\text{П5.24})$$

где величина \mathcal{E} выражена теперь в ридбергах. Именно для этого уравнения (П5.24) мы хотим найти решение в виде функции (П5.22), записанной в атомных единицах.

Подставим выражение (П5.22) в уравнение (П5.24). Записав лапласиан в сферических координатах, выполнив операции дифференцирования и исключив взаимно уничтожающиеся члены, получим

$$\begin{aligned} (H)_{\text{оп}} u = & \left(-\nabla^2 - \frac{2Z}{r} + Er \cos \theta\right) u = -Z^2 u + \\ & + \left[-\frac{d^2 v}{dr^2} + \left(2Z - \frac{2}{r}\right) \frac{dv}{dr} + \frac{2v}{r^2} + Er\right] \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr} \cos \theta + \\ & + Erv \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr} \cos^2 \theta. \quad (\text{П5.25}) \end{aligned}$$

Первый член $-Z^2 u$ сокращается с первым членом в правой части уравнения (П5.24). Напомним теперь, что мы пытаемся найти только те члены в функции v , которые линейны по приложенному полю E ; учтем также, что, согласно формуле (П5.7), первый зависящий от E член в выражении для энергии будет пропорционален E^2 . Отсюда следует, что в (П5.25) скобка $[-d^2 v/dr^2 + (2Z - 2/r) dv/dr + 2v/r^2 + Er]$ будет величиной первого порядка малости, тогда как выражение Erv и энергия \mathcal{E} в правой части уравнения (П5.24) будут величинами второго порядка. Таким образом, мы можем получить решение с желаемой степенью точности, просто отбрасывая указанные члены второго порядка и приравнивая нулю члены первого порядка.

Тогда получим дифференциальное уравнение

$$-\frac{d^2 v}{dr^2} + \left(2Z - \frac{2}{r}\right) \frac{dv}{dr} + \frac{2v}{r^2} + Er = 0. \quad (\text{П5.26})$$

Легко убедиться, что это уравнение имеет решение в виде полинома второй степени от r . Взяв в качестве пробной функции $v = Ar + Br^2$, мы увидим, что полученному уравнению можно строго удовлетворить при должном выборе коэффициентов A и B . Это приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} v = & -\frac{E}{2Z^3} \left(Zr + \frac{1}{2} Z^2 r^2\right), \\ u = & \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr} \left[1 - \frac{E}{2Z^3} \left(Zr + \frac{1}{2} Z^2 r^2\right) \cos \theta\right]. \quad (\text{П5.27}) \end{aligned}$$

Функция u содержит как член, не зависящий от внешнего поля E , так и линейный по E член из разложения волновой функции по степеням E .

Зная вид волновой функции (П5.27), можно определить индуцированный дипольный момент, а следовательно, и поляризуемость. Нам нужно найти среднее значение оператора $(M_z)_{оп} = -ez = -er \cos \theta$, выраженного в обычных единицах, или $-z = -r \cos \theta$, если использовать атомные единицы. Чтобы усреднить величину $-r \cos \theta$, умножим ее на квадрат волновой функции (П5.27) (она нормирована с точностью до членов порядка E^2) и проинтегрируем по объему. Оставляя лишь члены, линейные по E , получаем

$$(-r \cos \theta)_{cp} = \frac{Z^3}{\pi} \frac{E}{Z^3} \int e^{-2Zr} \left(Zr + \frac{1}{2} Z^2 r^2 \right) r \cos^2 \theta \, dv. \quad (\text{П5.28})$$

Интегрирование в сферической системе координат проводится без труда. Находим

$$\begin{aligned} (-r \cos \theta)_{cp} &= \frac{E}{\pi} 2\pi \int_0^1 \sin \theta \cos^2 \theta \, d\theta \times \\ &\times \int_0^\infty e^{-2Zr} r^3 \left(Zr + \frac{1}{2} Z^2 r^2 \right) dr = \frac{9}{4} \frac{E}{Z^4}. \end{aligned} \quad (\text{П5.29})$$

Используя этот результат, можно определить теперь поляризуемость (по-прежнему в атомных единицах) Единицей дипольного момента, которую мы используем, является произведение заряда e на боровский радиус a_0 . Единица измерения электрического поля, как было указано выше, есть *ридберг*/ $e a_0$. Поэтому единицей поляризуемости будет

$$\frac{e a_0}{\text{ридберг}/e a_0} = \frac{(e a_0)^2}{\text{ридберг}} = 2 (4\pi e_0) a_0^3. \quad (\text{П5.30})$$

Отсюда поляризуемость, вычисленная нами для основного состояния водородоподобного иона с атомным номером Z , согласно формуле (П5.29), равна

$$\alpha = \frac{4,5}{Z^4} (4\pi e_0) a_0^3. \quad (\text{П5.31})$$

Это есть то значение, которое было указано в предыдущем параграфе для $Z=1$ в качестве рассчитанного значения поляризуемости для водорода.

Поляризуемость можно также найти, вычисляя член второго порядка в выражении для энергии с помощью волновой функции (П5.27); при этом, определяя зависящее от E среднее значение энергии по волновой функции, правильной с точностью

до величин первого порядка по E , найдем его точно до членов второго порядка по E . Как видно из выражения (П5.25), результат действия гамильтониана на функцию u содержит, во-первых, член $-Z^2u$, который отвечает просто невозмущенному значению энергии, затем скобку, обращающуюся в нуль ввиду того, что функция v удовлетворяет уравнению (П5.26), и, наконец, член $Erv \sqrt{Z^3/\pi} e^{-Zr} \cos^2 \theta$. Умножив это последнее слагаемое на волновую функцию и проинтегрировав, получим зависящий от поля член в выражении для энергии. Поскольку функция v уже содержит E в виде множителя, достаточно взять просто невозмущенную волновую функцию под интегралом, чтобы получить член второго порядка в энергии. Таким путем находим, что зависящее от поля слагаемое в выражении для энергии равно

$$-\frac{E^2}{2Z^3} \frac{Z^3}{\pi} \int e^{-2Zr} \left(Zr + \frac{1}{2} Z^2 r^2 \right) r \cos^2 \theta \, dv = -\alpha \frac{E^2}{2}, \quad (\text{П5.32})$$

где поляризуемость α равна $9/4Z^2$ (в атомных единицах) или представляет собой величину (П5.31) в обычных единицах. Таким образом, оба наших расчета — прямой расчет поляризуемости и вычисление энергии — согласуются друг с другом.

Мы видим далее, каким оказывается действие возмущения на волновую функцию. Оно состоит в добавлении к исходной волновой функции s -типа компоненты p -типа, в результате чего значения волновой функции увеличиваются в области отрицательных z , где $\cos \theta$ принимает отрицательные значения, и уменьшаются в области положительных z . Именно такой эффект следовало бы ожидать при смещении распределения заряда полем, которое стремится оттолкнуть отрицательно заряженные электроны в направлении, противоположном направлению оси z . Таким образом, мы очень наглядно можем представить, какому видоизменению подвергается волновая функция под действием электрического поля; в этом случае имеет место гибридизация волновой функции.

В данном параграфе было выяснено, что в случае водорода можно найти точное решение задачи о поляризуемости. Вполне возможно, однако, и иногда полезно использовать вариационные методы для того, чтобы получать приближенные результаты; такой подход особенно полезен в применении к более сложным атомам; к этому вопросу мы вернемся ниже. Рассматривая атом водорода, мы нашли, что функция v имеет простой вид, описываемый выражением (П5.27). Предположим, однако, что нам не удалось определить ее вид. Не могли бы мы использовать приближенные функции, которые приводили бы к удовлетворительным приближенным результатам? Автор и Кирквуд [6] показали, что на этот вопрос следует ответить утвердительно. В качестве

иллюстрации был предложен следующий пример: можно было бы попытаться взять в качестве функции ψ степенную функцию r и варьировать коэффициент при ней и показатель степени, чтобы минимизировать энергию. Минимум имеет место при показателе степени, равном 1,5, и определенной таким способом энергии отвечает значение поляризуемости $(4,48/Z^4) (4\pi\epsilon_0) a_0^3$, весьма близкое к точной величине, которая дается формулой (П5.31). Мы увидим, что подобные вариационные методы полезны при рассмотрении задачи о силах Ван дер Ваальса, точное решение которой неизвестно.

Имеется одна характерная черта поляризуемости, которую нетрудно установить на основании полученных выше результатов: поляризуемость ионов очень быстро возрастает с увеличением их размеров. На это указывает наличие множителя Z^4 в знаменателе выражения для поляризуемости водородоподобных ионов; радиус орбиты обратно пропорционален Z , поэтому в данном случае поляризуемость пропорциональна четвертой степени радиуса орбиты. Это же свойство можно установить на основании выражения (П5.16), согласно которому поляризуемость обратно пропорциональна квадратам частот переходов из основного в возбужденные состояния. Значения этих частот возрастают как квадраты эффективных зарядов ядер, так что отсюда опять следует, что поляризуемость пропорциональна четвертой степени обратного эффективного заряда ядра. Эта сильная зависимость поляризуемости от размеров ионов является яркой характерной чертой поляризуемостей реальных ионов в кристаллах и молекулах. Отрицательно заряженные ионы, которые обычно гораздо больше положительных ионов, поляризуются значительно сильнее, и их поляризуемость возрастает с увеличением величины отрицательного заряда иона, сопровождающимся увеличением его размеров.

§ 4. Метод теории возмущений в задаче о силах Ван дер Ваальса для водорода

В двух предшествующих параграфах мы выяснили, как можно трактовать явление поляризации методом теории возмущений на основе точного решения или с помощью вариационного метода. В качестве примера применения этих методов мы рассмотрели простейший случай атома водорода. К задаче о поляризуемости атомов, содержащих более одного электрона, мы вернемся ниже. Предварительно, однако, начнем обсуждение вопроса о силах притяжения Ван дер Ваальса и рассмотрим подробно случай притяжения между двумя атомами водорода, исследование которого приведено с большой степенью точности.

Позднее будут рассмотрены силы Ван дер Ваальса для более тяжелых атомов.

Задача для случая водорода была рассмотрена в работах ряда авторов. Эйзеншитц и Лондон [4] использовали теорию возмущений, Хассе [7], а также Слэтер и Кирквуд [6] воспользовались простыми вариационными методами, а Паулинг и Бич [8] применили более усовершенствованный вариационный подход; этой задаче посвящен также ряд более поздних работ.

Сначала рассмотрим метод теории возмущений, используя, однако, более простой подход, чем в работе [4]. В качестве первого шага следует, подобно тому как мы поступали в § 1 и 2, ввести в гамильтониан член возмущения, описывающий взаимодействие между двумя атомами. Аналогично рассмотрению задачи о водороде по методу Гайтлера — Лондона в книге [1] нетрудно установить, что этот гамильтониан возмущения (в атомных единицах) имеет вид

$$(H^1)_{оп} = -\frac{2}{r_{1b}} - \frac{2}{r_{2a}} + \frac{2}{r_{12}} + \frac{2}{R}. \quad (\text{П5.33})$$

Нас интересует влияние этого члена на расстояниях, превышающих те, на которых метод Гайтлера — Лондона дает сколько-нибудь заметную энергию взаимодействия. В области столь больших расстояний допустимо разложить $(H^1)_{оп}$ в ряд по отрицательным степеням R .

Пусть ядро a находится в начале системы координат, а ядро b смещено на расстояние R от него вдоль положительного направления оси z . Обозначим через x_{1a} , y_{1a} , z_{1a} координаты первого электрона относительно ядра a и через x_{2b} , y_{2b} , z_{2b} — координаты второго электрона относительно ядра b . Такой выбор переменных будет удобен в том случае, когда электрон 1 находится вблизи ядра a , а электрон 2 — вблизи ядра b . Тогда имеем

$$\begin{aligned} r_{12} &= \sqrt{(x_{2b} - x_{1a})^2 + (y_{2b} - y_{1a})^2 + (z_{2b} - z_{1a} + R)^2} = \\ &= R \left\{ 1 + \frac{2}{R} (z_{2b} - z_{1a}) + \frac{1}{R^2} [(x_{2b} - x_{1a})^2 + \right. \\ &\quad \left. + (y_{2b} - y_{1a})^2 + (z_{2b} - z_{1a})^2] \right\}^{1/2}. \quad (\text{П5.34}) \end{aligned}$$

В указанных условиях величину $1/r_{12}$ можно разложить в степенной ряд, считая $(x_{2b} - x_{1a})/R$ и т. д. малыми величинами. В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{12}} &= \frac{1}{R} - \frac{1}{R^2} (z_{2b} - z_{1a}) - \frac{1}{2R^3} [(x_{2b} - x_{1a})^2 + \\ &\quad + (y_{2b} - y_{1a})^2] + \frac{1}{R^3} (z_{2b} - z_{1a})^2 + \dots \quad (\text{П5.35}) \end{aligned}$$

Используя (П5.35), можно найти теперь выражения для $1/r_{1b}$, полагая x_{2b} , y_{2b} , z_{2b} равными нулю, и аналогично для $1/r_{2a}$, приравнявая нулю переменные x_{1a} , y_{1a} , z_{1a} . Выполнив это и подставив полученные выражения в (П5.33), придем к следующему результату:

$$(H^1)_{оп} = \frac{2}{R^3} (x_{1a}x_{2b} + y_{1a}y_{2b} - 2z_{1a}z_{2b}) + \dots, \quad (\text{П5.36})$$

где последующие члены пропорциональны более высоким отрицательным степеням R . Члены, выписанные явно в выражении (П5.36), описывают взаимодействия спонтанных диполей двух атомов. В (П5.36) использованы атомные единицы; в обычных единицах энергия взаимодействия равна

$$\begin{aligned} (H^1)_{оп} &= \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0) R^3} (x_{1a}x_{2b} + y_{1a}y_{2b} - 2z_{1a}z_{2b}) = \\ &= \frac{1}{(4\pi\epsilon_0) R^3} [(M_{x1})(M_{x2}) + (M_{y1})(M_{y2}) - 2(M_{z1})(M_{z2})]. \end{aligned} \quad (\text{П5.37})$$

Мы выразили ее здесь через компоненты дипольных моментов электронов, принадлежащих двум атомам.

Затем необходимо найти матричные элементы этого гамильтониана возмущения $(H^1)_{оп}$ в представлении невозмущенных волновых функций. Обозначим орбитали, относящиеся к атому a , через a_n , а орбитали атомов b через b_n , где индекс n указывает квантовые числа (1 для основного состояния). Можно построить мультипликативные волновые функции типа Гайтлера — Лондона в виде $a_n(1)b_m(2)$. Строго говоря, мы должны использовать симметричные волновые функции вида $a_n(1)b_m(2) + b_m(1)a_n(2)$, но обменные интегралы в рассматриваемом случае будут равны нулю, так как по предположению межъядерное расстояние столь велико, что перекрытием можно пренебречь. Поэтому для наших целей достаточно использовать простые мультипликативные функции. Таким образом, мы имеем волновую функцию основного состояния $a_1(1)b_1(2)$ и набор волновых функций возбужденных состояний, квантовые числа которых символически обозначаются индексами n и m , принимающими всевозможные пары значений.

Матричный элемент оператора $(H^1)_{оп}$, взятый для основного состояния и одного из состояний вида $a_n(1)b_m(2)$, записывается как

$$\begin{aligned} (H^1)_{1, nm} &= \frac{1}{(4\pi\epsilon_0) R^3} [(M_{x1})_{1, n} (M_{x2})_{1, m} + (M_{y1})_{1, n} (M_{y2})_{1, m} - \\ &\quad - 2(M_{z1})_{1, n} (M_{z2})_{1, m}]. \end{aligned} \quad (\text{П5.38})$$

Энергия возбужденного состояния, отсчитанная от значения энергии основного состояния, будет равна величине $h\nu_{n1} + h\nu_{m1}$,

т. е. сумме энергий возбуждения электронов в двух атомах. Теперь можно с помощью теории возмущений найти во втором порядке изменение энергии, обусловленное силами Ван дер Ваальса. Поправка, добавляющаяся к невозмущенному значению энергии системы из двух атомов, будет равна

$$\text{Энергия Ван дер Ваальса} = - \sum_{n, m} \frac{(H^1)_{1, nm} (H^1)_{nm, 1}}{h\nu_{n1} + h\nu_{m1}}. \quad (\text{П5.39})$$

Далее нужно найти произведения $(H^1)_{1, nm} (H^1)_{nm, 1}$. Перемножая выражения типа (П5.38), получаем члены вида $(M_{x1})_{1, n} (M_{x1})_{n, 1} (M_{x2})_{1, m} (M_{x2})_{m, 1}$ и перекрестные члены типа $(M_{x1})_{1, n} (M_{z1})_{n, 1} (M_{x2})_{1, m} (M_{z2})_{m, 1}$. Последние, однако, равны нулю, что вытекает из следующего рассуждения. Как было отмечено выше, матричные элементы отличны от нуля лишь для переходов из основного состояния, являющегося s -состоянием, только в возбужденные состояния p -типа. Мы отметили также, что компоненты матрицы оператора $(M_z)_{оп}$ не равны нулю только для переходов в p -состояния с нулевым магнитным квантовым числом. С другой стороны, оператор $(M_x)_{оп}$ имеет исчезающие матричные элементы только для переходов в p -состояния, магнитные квантовые числа которых равны ± 1 . Иными словами, не существует переходов, для которых оба матричных элемента одновременно отличны от нуля, и поэтому такие произведения обращаются в нуль. Аналогичный вывод можно сделать для других перекрестных членов, выбирая полярную ось сферической системы координат направленной вдоль другой оси прямоугольной системы координат.

Подставляя выражения матричных элементов (П5.38) в (П5.39), получим (в обычных единицах)

$$\begin{aligned} \text{Энергия Ван дер Ваальса} = & - \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6} \times \\ & \times \sum_{n, m} \frac{|M_x|_{1n}^2 |M_x|_{1m}^2 + |M_y|_{1n}^2 |M_y|_{1m}^2 + 4 |M_z|_{1n}^2 |M_z|_{1m}^2}{h\nu_{n1} + h\nu_{m1}}. \quad (\text{П5.40}) \end{aligned}$$

Ввиду наличия сферической симметрии получим $|M_x|_{1n}^2 = |M_y|_{1n}^2 = |M_z|_{1n}^2$, если должным образом учесть то обстоятельство, что эти три матричных элемента отвечают переходам в возбужденные состояния с различными магнитными квантовыми числами. Отсюда

$$\text{Энергия Ван дер Ваальса} = - \frac{6}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6} \sum_{n, m} \frac{|M_z|_{1n}^2 |M_z|_{1m}^2}{h\nu_{n1} + h\nu_{m1}}. \quad (\text{П5.41})$$

Вводя силы осцилляторов, определенные согласно (П5.13), и используя соотношение (П5.15), находим

$$\begin{aligned} \text{Энергия Ван дер Ваальса} = \\ = - \frac{24Ry}{(R/a_0)^6} \sum_{n, m} \frac{f_{n1}f_{m1}}{(h\nu_{n1}/Ry)(h\nu_{m1}/Ry)(h\nu_{n1} + h\nu_{m1})/Ry}. \end{aligned} \quad (\text{П5.42})$$

Эйзеншитц и Лондон [4] вычислили двойную сумму в выражении (П5.42), используя значения сил осцилляторов, заданные формулами (П5.18) и (П5.19) для случая водорода. Они разбили сумму на три части, включив в первую слагаемые, для которых оба индекса n и m относятся к дискретным состояниям, во вторую вошли те слагаемые, для которых один из индексов относится к дискретному состоянию, а другой — к состоянию непрерывного спектра, и третья часть включает члены, для которых оба состояния принадлежат непрерывному спектру. Для этих вкладов в сумму Эйзеншитц и Лондон получили следующие результаты.

Вклады в сумму $\sum_{n, m}$ в выражении (П5.42):

Оба состояния из дискретного спектра	0,329	(П5.43)
Одно состояние из дискретного спектра, другое — из непрерывного	0,184	
Оба состояния из непрерывного спектра	0,027	
Сумма . . .	0,540	

Используя эти значения, из выражения (П5.42) находим

$$\text{Энергия притяжения Ван дер Ваальса для водорода} = \frac{12,96}{(R/a_0)^6} \text{ ридберг}. \quad (\text{П5.44})$$

Этот результат должен быть верен с точностью до небольших ошибок, обусловленных тем, что мы взяли недостаточное число десятичных знаков для суммируемых величин, а также тем, что выражение (П5.19) не является совершенно точным.

§ 5. Вариационные методы в задаче о силах Ван дер Ваальса в случае водорода

Силам притяжения Ван дер Ваальса в водороде посвящено несколько различных вариационных расчетов. Подход первого типа был предложен в работе Хассе [7] и развит в дальнейшем Слэтером и Кирквудом [6]. Идея, на которой базируются указанные вычисления, возникла на основе точной трактовки задачи о поляризуемости водорода, приводящей к выражениям

(П5.27). Как явствует из этих выражений, возмущенная волновая функция атома водорода во внешнем поле может быть представлена в виде произведения невозмущенной волновой функции $\sqrt{Z^3/\pi}e^{-Zr}$ и множителя, равного сумме единицы и члена, учитывающего возмущение. Этот член возмущения в свою очередь можно записать как произведение энергии возмущения $Er \cos \theta$ на функцию r . Хассе предположил, что и в более общих случаях можно представить возмущенную волновую функцию в таком же точно общем виде, а именно как произведение невозмущенной волновой функции на множитель, отличающийся от единицы добавкой члена, равного энергии возмущения, умноженной на функцию расстояния от ядра. В частности, в случае притяжения Ван дер Ваальса в водороде можно было бы взять произведение невозмущенной волновой функции, которая для двух атомов водорода имеет вид $(Z^3/\pi)\exp[-Z(r_{1a}+r_{2b})]$, на фактор, отличающийся от единицы слагаемым, равным произведению энергии возмущения, определяемой выражением (П5.36), на функцию переменных r_{1a} и r_{2b} . Слэтер и Кирквуд показали, что, подставив решение в такой предполагаемой форме в дифференциальное уравнение, можно доказать, что решение подобного вида действительно существует, хотя они и не получили явного выражения для функции от r_{1a} и r_{2b} . Однако ввиду успеха вариационного расчета поляризуемости водорода эти авторы попытались выбрать искомую функцию в виде

$$r_{1a}^{\nu} r_{2b}^{\nu};$$

они установили, что энергия минимальна при значении $\nu=0,325$, и нашли для величины энергии Ван дер Ваальса результат, аналогичный приведенному в формуле (П5.44), но со значением $-12,98$ для численной постоянной. Отличие этого значения от полученного Эйзеншитцем и Лондоном находится в пределах ошибок каждого из расчетов.

Паулинг и Бич [8] выполнили значительно более сложный вариационный расчет, и их результаты являются самыми точными из имеющихся для притяжения Ван дер Ваальса в водороде при больших R . Прежде всего в расчетах этих авторов учитывались более высокие степени обратного расстояния R , чем рассматриваемые выше. При этом принимались во внимание не только диполь-дипольные взаимодействия между атомами, но также и диполь-квадрупольные и квадруполь-квадрупольные взаимодействия, или члены, обратно пропорциональные шестой, восьмой и десятой степеням R . Помимо этого, волновая функция описывалась совершенно иным образом, по существу в рамках метода конфигурационного взаимодействия; был введен полный набор одноэлектронных функций, и по ним

была разложена возмущенная волновая функция. Эти одноэлектронные функции представляют собой произведения радиальных функций на соответствующие функции угловых переменных. Оказывается возможным построить полный набор радиальных функций, используя одну экспоненту e^{-Zr} , умноженную на полином от r . Для наименьшего состояния с заданным значением l этот полином состоит из единственного члена r^l ; для следующего по энергии состояния полином имеет вид $r^l(1+ar)$, где коэффициент a выбирается так, чтобы эта функция была ортогональна волновой функции нижайшего состояния. Для следующего состояния берется полином $r^l(1+ar+br^2)$ и подбором величин a и b обеспечивается ортогональность данного состояния обоим состояниям с меньшей энергией и т. д. Как было установлено позднее, подобные функции оказываются очень полезными при рассмотрении конфигурационного взаимодействия в атоме гелия. Поскольку эти функции образуют полный набор, по ним можно разложить произвольную функцию.

Как следует из расчета энергии притяжения Ван дер Ваальса по теории возмущений с использованием гамильтониана (П5.37), возмущенную волновую функцию можно представить в виде суммы волновой функции основного состояния и члена возмущения, который соответствует возбуждению обоих электронов в p -состояния. Подобные волновые функции можно построить с помощью волновых функций p -типа, принадлежащих полному набору, описанному выше. Паулинг и Бич использовали несколько таких функций, варьируя коэффициенты при них, с тем чтобы минимизировать энергию, и включая добавочные члены подобного вида в таком количестве, пока не удалось добиться сходимости результатов к определенной величине. Они получили для коэффициента в выражении типа (П5.44) значение 12,99806, которое можно считать наиболее надежным из имеющихся до сих пор. Одновременно, как мы упомянули, они рассмотрели диполь-квадрупольное и квадруполь-квадрупольное взаимодействие. При расчете влияния первого из них понадобилось найти обусловленные возмущением члены в волновой функции, соответствующие возбуждению одного электрона в p -состояние, а другого — в d -состояние; для второго из указанных типов взаимодействия учитывалось возбуждение обоих электронов в d -состояния. С учетом этих членов было получено следующее выражение для энергии притяжения Ван дер Ваальса:

Энергия притяжения Ван дер Ваальса для водорода =

$$= - \frac{12,99806}{(R/a_0)^6} - \frac{248,798}{(R/a_0)^8} - \frac{2270,42}{(R/a_0)^{10}} - \dots \text{ридберг.} \quad (\text{П5.45})$$

Следует помнить, что данное выражение Паулинга и Бича, подобно другим разложениям по обратным степеням R , справедливо только в области достаточно больших расстояний, где нет никакого заметного перекрытия распределений заряда обоих атомов. Хиршфельдер и Линнет [9] выполнили вариационный расчет, построенный таким образом, что его результаты непрерывно переходят от области Ван дер Ваальса к области перекрытия заряда. Они воспользовались следующим методом. Прежде всего, в качестве исходных функций были взяты атомные орбитали a и b , относящиеся к каждому из двух центров, с переменными коэффициентами α в показателях степени экспонент орбиталей. Произведение функций $a(1)b(2)$ было умножено на многочлен, подобный тем, которые мы рассматривали в других вариационных расчетах. Этот многочлен, помимо единицы, включал член, обусловленный энергией возмущения. Этот многочлен, однако, был несколько иного вида, чем в работах других авторов; Хиршфельдер и Линнет [9] взяли его в виде

$$1 + A(x_{1a}x_{2b} + y_{1a}y_{2b}) + Bz_{1a}z_{2b}, \quad (\text{П5.46})$$

где коэффициенты A и B варьировались с тем, чтобы минимизировать энергию для каждого значения межъядерного расстояния. Форма данного члена является менее общей, чем в вариационной функции Слэтера и Кирквуда [6], которые умножили коэффициенты A и B на степенную функцию от $r_{1a}r_{2b}$, но эта форма, однако, является более общей в том отношении, что коэффициенты A и B можно варьировать независимо, тогда как в работе [6] налагалось ограничение $B = -2A$. Хиршфельдер и Линнет не пытались представить коэффициенты A и B в виде разложений по обратным степеням R , как в работе Паулинга и Бича [8].

Хиршфельдер и Линнет затем построили из таких произведений двухэлектронную волновую функцию должной симметрии в виде

$$a(1)b(2)[1 + A(x_{1a}x_{2b} + y_{1a}y_{2b}) + Bz_{1a}z_{2b}] + \\ + b(1)a(2)[1 + A(x_{1b}x_{2a} + y_{1b}y_{2a}) + Bz_{1b}z_{2a}]. \quad (\text{П5.47})$$

Она переходит в обычную функцию Гайтлера — Лондона при обращении в нуль коэффициентов A и B . Наконец, был добавлен ионный член $a(1)a(2) + b(1)b(2)$, коэффициент при котором можно было подбирать. Затем параметры A , B , коэффициент в показателе экспоненты орбитали α и коэффициент при ионном члене варьировались при каждом значении R . Таким способом было получено довольно хорошее приближение для притяжения Ван дер Ваальса на больших расстояниях (хотя и не

столь точное, как результат Паулинга и Бича). Заметим, что в области малых расстояний, если положить A и B равными нулю, данный расчет сводится к расчету Вейнбаума, изложенному в книге [1].

Хиршфельдер и Линнет нашли, как и следовало ожидать, что параметры A и B стремятся к нулю при бесконечно больших значениях R . В области больших R коэффициент B приблизительно равен $-2A$, как можно было ожидать по виду энергии возмущения, но это равенство вовсе не имеет места при меньших R . Однако не было обнаружено тенденции к бесконечному росту A и B при малых R ; на мысль о возможности такой тенденции наводит разложение по обратным степеням R , такое, как в результатах Паулинга и Бича. Интересно сравнить рассчитанные в работе [9] значения энергии взаимодействия двух атомов водорода с теми, которые получили Паулинг и Бич на основе выражения (П5.45). Это сравнение проведено в табл. П5.2, аналогичной табл. VII из работы Хиршфельдера и Линнета [9].

Таблица П5.2

Энергия взаимодействия двух атомов водорода в основном состоянии $^1\Sigma_g^+$, согласно Паулингу и Бичу (П. Б.) и Хиршфельдеру и Линнету (Х. Л.)

Энергия выражена в ридбергах, расстояние — в атомных единицах.

$\frac{R}{a_0}$	$-\frac{12,99806}{(R/a_0)^8}$	$-\frac{248,798}{(R/a_0)^7}$	$-\frac{2270,42}{(R/a_0)^{10}}$	П. Б.	Х. Л.
6	-0,000278	-0,000148	-0,000038	-0,000464	-0,00533
7	-0,0001105	-0,0000432	-0,0000080	-0,0001617	-0,000293
8	-0,0000495	-0,0000149	-0,0000021	-0,0000665	-0,0000800
10	-0,0000130	-0,0000025	-0,0000002	-0,0000157	-0,0000141
12	-0,0000044	-0,0000006	-0,0000000	-0,0000050	-0,0000042

Мы вычислили и привели в этой таблице сначала значения трех членов ряда Паулинга и Бича (П5.45), чтобы показать их сравнительную величину в области межъядерных расстояний, на которых действуют силы Ван дер Ваальса. Видно, что ряд довольно быстро сходится при больших из интересующих нас значений расстояния. Для таких больших расстояний, когда $R/a_0 \geq 10$, результат Паулинга и Бича для энергии оказывается ниже, чем у Хиршфельдера и Линнета, что объясняется большей гибкостью волновой функции Паулинга и Бича, отмеченной нами. Однако в области меньших расстояний, когда становится существенным перекрытие, более низким является значение энергии по Хиршфельдеру и Линнету, притом настолько ощу-

тимо при $R/a_0=6$, что становится ясно: в этой области эффект Ван дер Ваальса полностью перекрывается обменным эффектом, характерным для расчета Гайтлера — Лондона. При еще меньших расстояниях можно пренебречь очень малыми вкладами, обусловленными силами Ван дер Ваальса, и данный расчет был бы идентичен расчету Вейнбаума, рассмотренному нами в гл. 4 книги [1].

Очень интересно было бы познакомиться с таким расчетом для задачи о водороде, в котором взаимодействие Ван дер Ваальса на больших расстояниях рассматривалось бы по методу Паулинга и Бича (являющемуся, несомненно, очень точным в этом пределе), который затем приводил бы к результатам Джеймса и Кулиджа в области меньших расстояний и который, наконец, воспроизводил бы результаты Хиллерааса для комбинированного атома гелия. Такой расчет не содержит принципиальных трудностей, но, насколько известно автору, он до сих пор не проделан.

Следует сделать еще одно замечание по поводу работы Хиршфельдера и Линнета. Эти авторы рассмотрели также состояние с отталкиванием ${}^3\Sigma_u$ молекулы H_2 и нашли, что, как и следовало ожидать, притяжение Ван дер Ваальса приводит к появлению минимума энергии на большом расстоянии (между $8a_0$ и $9a_0$), прежде чем начинает преобладать отталкивание, описанное нами в гл. 3 и 4 книги [1]. Этот случай, конечно, более интересен для исследования роли притяжения Ван дер Ваальса, чем случай основного состояния, в котором единственный эффект сил Ван дер Ваальса состоит в некотором увеличении притяжения на больших расстояниях по сравнению с результатом расчета Гайтлера — Лондона.

§ 6. Силы притяжения Ван дер Ваальса в гелии

Задача о силах притяжения Ван дер Ваальса между двумя атомами гелия рассматривалась во многих работах, хотя эти расчеты и не столь полны, как в случае водорода. Указанная задача по своей сути более интересна, чем задача для основного состояния водорода, так как здесь притяжение Ван дер Ваальса в сочетании с отталкиванием того типа, который мы рассмотрели в книге [1], приводит к возникновению энергетического минимума на больших расстояниях, ответственного за переход гелия в жидкое состояние при очень низких температурах. Эта задача составляет содержание знаменитой проблемы кинетической теории газов, интересной своей связью с явлением конденсации Бозе — Эйнштейна и образованием фазы гелия-II. Поэтому было особенно важно тщательно определить характер

энергетической зависимости вблизи минимума. Первые расчеты были проделаны вариационным методом, и лишь недавно появились точные вычисления, выполненные с помощью теории возмущений. Поскольку последние более надежны в области наибольших значений R , мы начнем рассмотрение с них.

Один из первых расчетов притяжения Ван дер Ваальса в гелии методом теории возмущений выполнил Маргенау [10], позднее более точное вычисление с помощью того же метода проделали Далгарно и Линн [11]. В случае гелия не существует замкнутых аналитических выражений для сил осцилляторов, и в вычислениях для различных частей спектра пришлось использовать данные, взятые из различных источников. Далгарно и

Таблица П5.3

Силы осцилляторов для переходов $1s^2\ ^1S \rightarrow 1snp\ ^1P$
в гелии; оценки Далгарно и Линна [11]

n	f_{n1}
2	0,239
3	0,081
4	0,0325
5	0,0162
6	0,0093
7	0,0058
8	0,0039
9	0,0027
10	0,0020
$11 - \infty$	0,0088
Непрерывный спектр	1,599

Значения df/dE для распределения f
в непрерывном спектре, по данным
Далгарно и Линна

Здесь E — энергия для различных длин волн λ ,
отсчитываемая вверх от границы дискретного спектра

λ , Å	E , ридберг	df/dE
504,27	0,00	0,97
420	0,37	0,73
340	0,50	0,88
260	1,71	0,28
180	3,27	0,11
100	7,31	0,016
20	43,8	0,00018

Линн уточнили вычисленные значения и модифицировали их таким образом, чтобы удовлетворить правилу сумм (П5.14). Таким образом, приведенные в их работе значения не являются, строго говоря, результатами точного расчета, а получены с помощью некоторого преобразования. Эти данные, однако, представляют собой наиболее близкую к точным значениям оценку, которую смогли дать авторы. В табл. П5.3 приведены значения f для дискретного спектра. Указан также приближенный результат Далгарно и Линна для вклада от распределения сил осцилляторов в непрерывном спектре. Основной вклад в полную силу осцилляторов для непрерывного спектра, которая должна составлять 1,599, чтобы вся сумма принимала правильное значение 2, дает непрерывная функция распределения, значения производной от которой указаны в табл. П5.3; кроме того, небольшая часть полной величины обусловлена двойными переходами, при которых возбуждаются оба электрона. Эти переходы, согласно оценке, вносят в результат для непрерывного спектра заметный вклад, не учитываемый такой функцией распределения.

Далгарно и Линн использовали значения сил осцилляторов, приведенные в табл. П5.3, для приближенного вычисления как поляризуемости атома гелия, так и величины члена в энергии притяжения Ван дер Ваальса, соответствующего шестой степени обратного расстояния. Для первой из этих величин была получена следующая оценка:

$$4 \sum_n \frac{f_{n1}}{(h\nu_{n1}/Ry)^2} + \text{Вклад от непрерывного спектра} = 1,390, \quad (\text{П5.48})$$

$$\alpha = 1,390 (4\pi\epsilon_0)^2 a_0^3,$$

что с точностью до нескольких десятых долей процента согласуется с экспериментальным значением поляризуемости, определенным по данным для показателя преломления при нулевой частоте. В этом расчете была использована формула (П5.16). Далее с помощью выражения (П5.42) был найден вклад в энергию Ван дер Ваальса, отвечающий шестой степени обратного расстояния. Этот результат имеет вид

$$24 \sum_{n, m} \frac{f_{n1} f_{m1}}{(h\nu_{n1}/Ry)(h\nu_{m1}/Ry)(h\nu_{n1} + h\nu_{m1})/Ry} = 3,001, \quad (\text{П5.49})$$

$$\text{Энергия Ван дер Ваальса} = - \frac{3,001}{(R/a_0)^6} \text{ ридберг.}$$

Полученное значение недоступно прямой экспериментальной проверке, поскольку в опытах по определению уравнения

состояния имеют дело с полной энергией межатомного взаимодействия, содержащей вклады как от сил притяжения, так и от сил отталкивания. Однако, оценив, как будет показано ниже, эффект, обусловленный отталкиванием, мы найдем, что выражение (П5.49), по-видимому, согласуется с результатами эксперимента.

В этих расчетах для гелия выявляется одна характерная особенность, свидетельствующая о довольно сильном отличии от случая водорода. Она заключается в том, что вклад от непрерывного спектра в сумму сил осцилляторов оказывается очень большим (1,599 из общей величины 2, согласно табл. П5.3) по сравнению со случаем водорода (0,4342 из общей величины 1, согласно табл. П5.1). Вследствие этого если мы попытаемся определить среднее значение $h\nu/Ry$ таким образом, как указано в (П5.20), то получим совершенно иные результаты, чем для водорода. Поскольку в данном случае силы осцилляторов f в сумме дают 2, а не 1, следует определить величину

$$\frac{2}{(h\nu/Ry)_{\text{cp}}^2} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f_{n1}}{(h\nu/Ry)^2} + \int_0^{\infty} \frac{df/dE}{(1+E)^2} dE = \frac{1,390}{4},$$

где мы использовали результат (П5.48). Отсюда $(h\nu)_{\text{cp}} = 2,40$ *ридберг*, что в 1,33 раза больше энергии ионизации, равной 1,80 *ридберг*. Эту величину нужно сравнить со значением 0,9428, которое мы нашли в (П5.21) для водорода. Иными словами, центр тяжести, если так можно выразиться, спектра водорода лежит в области дискретного спектра, тогда как для гелия он сдвинут на значительное расстояние в область непрерывного спектра.

Обсудим теперь некоторые из вариационных расчетов поляризуемости и сил притяжения Ван дер Ваальса, выполненных для гелия. Одним из первых такое вычисление предпринял Хассе [7]. Он получил для энергии Ван дер Ваальса величину в ридбергах $-2,826/(R/a)^6$, что следует сравнить со значением $-3,001/(R/a_0)^6$, найденным с помощью более точного метода теории возмущений [см. (П5.49)]. Слэтер и Кирквуд [6] использовали несколько различных вариационных функций и в качестве наиболее надежного получили значение $-3,18/(R/a_0)^6$ *ридберг*. Этот результат был найден с помощью метода, подобного использованному теми же авторами в случае водорода, и невозмущенная волновая функция атома гелия была взята в виде, установленном автором настоящей книги [12]. Эта волновая функция была построена путем сшивания различных аналитических выражений, относящихся к разным частям конфигурационного пространства, и давала, как можно было полагать,

довольно хорошее приближение, хотя и не с такой степенью точности, как волновые функции, найденные позднее Хиллераасом. Автор вычислил с этой волновой функцией энергию отталкивания, воспользовавшись методом, аналогичным описанному в гл. 6 книги [1], и получил набор численных значений, который вполне удовлетворительно можно описать с помощью экспоненциальной функции $35,3 \exp[-2,43(R/a_0)]$ (в ридбергах). Этот результат для взаимодействия отталкивания очень близок к найденному в расчете Гриффинга и Венера, описанном в работе [1], гл. 6, § 4.

Слэтер и Кирквуд предположили, что потенциал межатомного взаимодействия двух атомов гелия можно аппроксимировать просто суммой притяжения Ван дер Ваальса, обратно пропорционального шестой степени расстояния, и этого экспоненциального отталкивания. Они получили выражение

$$\text{Энергия} = \left[35,3 \exp\left(-2,43 \frac{R}{a_0}\right) - \frac{3,18}{(R/a_0)^6} \right] \text{ ридберг. (П5.50)}$$

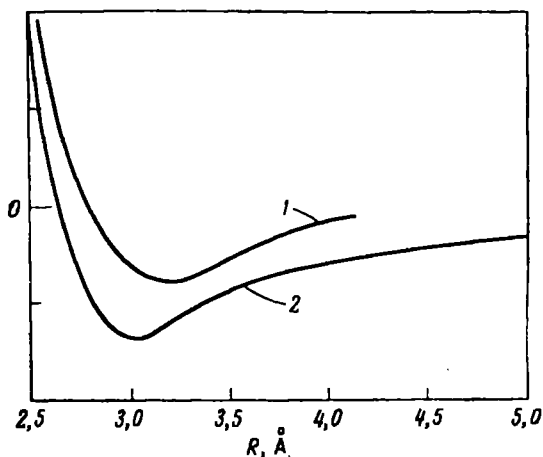
Авторы, конечно, понимали, что это простое сложение названных эффектов не оправдано с теоретической точки зрения, но выражение (П5.50), рассматриваемое в качестве интерполяционной формулы, тем не менее сводится к правильным выражениям как для очень больших расстояний R , так и в области значительно меньших R и поэтому представляется разумным приближением. Оказалось, что оно приводит к удивительно хорошему согласию с результатами эксперимента, и это выражение было положено в основу расчета уравнения состояния, которое, видимо, близко к истинному. По мнению ряда авторов, этот успех является, вероятно, следствием компенсации ошибок. Сравнивая выражения (П5.50) и (П5.49), мы замечаем, что член, обратно пропорциональный выражению в шестой степени в (П5.50), слишком велик. С другой стороны, в нем опущены члены, обратно пропорциональные восьмой, десятой и более высоким степеням, которые должны быть учтены, подобно тому как это сделали в случае водорода Паулинг и Бич [см. выражение (П5.45) и табл. П5.2]. По-видимому, ошибка в члене с R^{-6} компенсирует неточность, вызванную отбрасыванием этих членов. Тот факт, что член, обратно пропорциональный шестой степени расстояния, не является верным в области меньших значений R , оказывается более или менее замаскированным вследствие очень сильного экспоненциального отталкивания в этой области.

Впоследствии еще ряд расчетов был выполнен вариационным методом, хотя ни один из них не привел к абсолютно надежным результатам. Мы кратко опишем только один из недав-

них расчетов, проделанный Муром [13]. Вычисления этого автора очень похожи на расчет Хиршфельдера и Линнета [9] в задаче о водороде. Он взял волновую функцию в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 & a(1) \alpha(1) a(2) \beta(2) b(3) \alpha(3) b(4) \beta(4) \times \\
 & \times [1 + A(x_{a1}x_{b3} + x_{a1}x_{b4} + x_{a2}x_{b3} + x_{a2}x_{b4} + \\
 & \quad + y_{a1}y_{b3} + y_{a1}y_{b4} + y_{a2}y_{b3} + y_{a2}y_{b4}) + \\
 & \quad + B(z_{a1}z_{b3} + z_{a1}z_{b4} + z_{a2}z_{b3} + z_{a2}z_{b4})] + \\
 & \quad + \text{Члены, получаемые перестановкой индексов.} \quad (\text{П5.51})
 \end{aligned}$$

Сходство с функцией Хиршфельдера — Линнета, заданной согласно (П5.47) и описывающей отталкивание в системе из двух атомов водорода, является очевидным. Мур варьировал параметры A и B при различных значениях R , оставляя неизменными атомные орбитали a и b , взятые в виде водородоподобных



Фиг. П5.1. Энергия взаимодействия двух атомов гелия в области минимума, обусловленного притяжением Ван дер Ваальса.

Кривая Мура (1) взята из работы [13]; кривая Слэтера и Кирквуда (2) — из работы [9].

функций с параметром экранирования, равным $27/16$. Таким образом, если не считать членов возмущения, пропорциональных A и B , его функция совпадает с функцией, использованной Гриффингом и Венером. На фиг. П5.1 изображена зависимость энергии от межъядерного расстояния, определенная Муром, и для сравнения приведена кривая Слэтера и Кирквуда, соответствующая выражению (П5.50). Видно, что последняя кривая

дает меньшую энергию в области больших значений R , что естественно, так как член обратной шестой степени в данном случае слишком велик, но в общем имеется довольно удовлетворительное согласие между двумя кривыми; это указывает на то, что результаты, полученные на основе расчета Мура, будут неплохо соответствовать экспериментальным данным.

Резюмируя это обсуждение притяжения Ван дер Ваальса в гелии, можно сказать то же, что и в случае водорода: мы все еще не имеем единого подхода, который был бы справедлив для всех значений R и обладал бы всеми положительными чертами различных методов, развитых до сих пор. Было бы очень желательно иметь для гелия такой расчет, результат которого при очень больших R сводился бы к значению, полученному Далгарно и Линном, и который обладал бы ценным качеством расчета Мура, обеспечивая плавный переход от этой области больших расстояний к области отталкивания. Далее, хотелось бы, чтобы он обладал достоинствами принадлежащего Хуцинаге вычисления энергии отталкивания на меньших расстояниях, рассмотренного в работе [1], гл. 6, § 4, и, наконец, чтобы он сводился к достаточно точному расчету комбинированного атома бериллия.

§ 7. Общая связь между поляризуемостью и притяжением Ван дер Ваальса

Для более тяжелых атомов отсутствуют расчеты, которые были бы так же полны, как для случаев водорода и гелия. Был предпринят, однако, ряд попыток развить общие методы рассмотрения N -электронных атомов, с помощью которых удалось бы по крайней мере оценить эффекты притяжения Ван дер Ваальса в достаточно хорошем приближении. Эти попытки восходят главным образом к ранним работам Эйзеншитца и Лондона [4], Слэтера и Кирквуда [6], Лондона [4, 15], Кирквуда [16], Винти [17], Гельмана [18] и др. Все они основаны на использовании средних энергий возбуждения, подобных введенным нами согласно (П5.20) и (П5.49). Впервые идея о применении таких средних энергий была выдвинута в работе [19], посвященной рассмотрению задачи о H_2^+ в случае больших межъядерных расстояний по методу теории возмущений; этот пример особенно удобен для исследования указанным методом, поскольку результаты допускают проверку путем сравнения с точным решением. Обсуждение этих результатов, а также подробное рассмотрение общей задачи о силах Ван дер Ваальса проводится в весьма полезной обзорной статье Маргенау [20].

Пусть имеется атом с N электронами (мы обсудим ниже вопрос о том, следует ли считать N полным числом электронов

или только их числом во внешней оболочке). Определение (П5.20) можно обобщить следующим образом:

$$\frac{N}{(h\nu/Ry)_{\text{ср}}^2} = \sum_n \frac{f_{n1}}{(h\nu/Ry)^2} + \text{Вклад от непрерывного спектра.} \quad (\text{П5.52})$$

Комбинируя (П5.52) с выражением (П5.17), приходим к результату

$$\alpha = \frac{4N(4\pi\epsilon_0)a_0^3}{(h\nu/Ry)_{\text{ср}}^2} \quad (\text{П5.53})$$

и

$$\left(\frac{h\nu}{Ry}\right)_{\text{ср}} = \sqrt{\frac{4N(4\pi\epsilon_0)a_0^3}{\alpha}}. \quad (\text{П5.54})$$

Аналогичным образом можно переписать формулу (П5.10), как если бы в имеющейся в ней сумме был только один член, что дает

$$\alpha = 2 \frac{|M_z|^2}{(h\nu)_{\text{ср}}}. \quad (\text{П5.55})$$

Отсюда, используя (П5.53), имеем

$$|M_z|^2 = \frac{\alpha}{2} (h\nu)_{\text{ср}} = \frac{2N(4\pi\epsilon_0)a_0^3}{(h\nu)_{\text{ср}}} Ry^2. \quad (\text{П5.56})$$

Обратимся теперь к выражению (П5.41) для энергии Ван дер Ваальса и заменим в нем двойную сумму одним членом, а вместо величин $h\nu$ возьмем $(h\nu)_{\text{ср}}$. При этом получим

$$\begin{aligned} \text{Энергия Ван дер Ваальса} &= -\frac{6}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6} \frac{(|M_z|^2)^2}{2(h\nu)_{\text{ср}}} = \\ &= -\frac{3}{2} \frac{|M_z|^2 \alpha}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6} |M_z|^2, \end{aligned} \quad (\text{П5.57})$$

$$\text{Энергия Ван дер Ваальса} = -\frac{12}{(R/a_0)^6} \sqrt{N} \left[\frac{\alpha}{4(4\pi\epsilon_0)a_0^3} \right]^{3/2}, \quad (\text{П5.58})$$

где при выводе последнего равенства мы использовали формулу (П5.54).

Видно, что выражение (П5.57) эквивалентно формуле (П5.2) для энергии притяжения Ван дер Ваальса, которую мы получили из интуитивных соображений. Соотношение (П5.58) характеризует связь между поляризуемостью и энергией Ван дер Ваальса. Поскольку поляризуемость определяется опытным путем через диэлектрическую проницаемость, это соотношение дает нам метод расчета притяжения Ван дер Ваальса для случая более тяжелых атомов, когда непосредственное вычисление было бы затруднительным. Проверим это последнее равенство

в двух случаях — водорода и гелия, — для которых мы указали в настоящей главе точные значения рассматриваемых величин. В случае водорода, согласно (П5.31), $\alpha = 4,5 (4\pi e_0) a_0^3$, поэтому мы должны были бы ожидать, что энергия Ван дер Ваальса будет составлять

$$-\frac{12}{(R/a_0)^6} (1,125)^{3/2} = -\frac{14,32}{(R/a_0)^6}, \quad (\text{П5.59})$$

что следует сравнить с правильным значением $-13,00/(R/a_0)^6$, приведенным в выражении (П5.45). В случае гелия (при $N=2$) мы имеем $\alpha = 1,390 (4\pi e_0) a_0^3$, согласно (П5.48), так что для энергии Ван дер Ваальса получилась бы величина

$$-\frac{12}{(R/a_0)^6} \sqrt{2} (0,3475)^{3/2} = -\frac{3,47}{(R/a_0)^6}, \quad (\text{П5.60})$$

которую следует сравнить с точным значением $-3,001/(R/a_0)^6$, указанным в выражении (П5.49). В обоих случаях соотношение (П5.58) дает результаты, удовлетворительно согласующиеся с точными значениями по порядку величины, но это соответствие не является действительно количественным, как могло бы показаться при столь сжатом изложении метода вывода этого соотношения.

Слэтер и Кирквуд [6] получили соотношение, подобное (П5.58), но не используя среднюю разность энергий $(\hbar\nu)_{\text{ср}}$, а с помощью вариационного метода. Их выражение совпадает с (П5.58), за исключением того, что коэффициент имеет другое значение, равное $8 \cdot 1,36 = 10,88$ вместо 12. При этом значении коэффициента соответствие значительно улучшается как для водорода, так и для гелия; коэффициент 14,32 в (П5.59) почти точно заменяется правильным числом 13,00, а коэффициент 3,47 из (П5.60) переходит приблизительно в 3,14, что гораздо ближе к правильному значению 3,001.

Полученные выражения можно модифицировать таким образом, чтобы они описывали притяжение Ван дер Ваальса между двумя атомами различного типа. Так, в выражении (П5.41) мы можем считать, что первый множитель $|M_z|_{1n}^2$ относится к атому одного сорта, а второй $|M_z|_{1m}^2$ — к атому другого сорта; пусть их поляризуемости обозначены α_1 и α_2 соответственно. С помощью (П5.54) можно определить средние энергии $\hbar\nu_1$ и $\hbar\nu_2$ для обоих атомов; при этом мы получили бы

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hbar\nu}{Ry}\right)_1 &= \sqrt{\frac{4N_1 (4\pi e_0) a_0^3}{\alpha_1}}, \\ \left(\frac{\hbar\nu}{Ry}\right)_2 &= \sqrt{\frac{4N_2 (4\pi e_0) a_0^3}{\alpha_2}}. \end{aligned} \quad (\text{П5.61})$$

В знаменателе выражения (П5.41) теперь нужно написать $h\nu_1 + h\nu_2$. В результате находим

$$\text{Энергия Ван дер Ваальса} = -\frac{3}{2} \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2 R^6} \frac{\alpha_1 \alpha_2}{(1/h\nu_1) + (1/h\nu_2)}. \quad (\text{П5.62})$$

Это выражение было проанализировано, в частности, Гельманом [18]. Если считать правильными результаты Слэтера и Кирквуда, то коэффициент в (П5.62) следует заменить на 1,36.

Формулы настоящего параграфа, несомненно, можно использовать для грубой оценки порядка величины энергии Ван дер Ваальса, но сам способ их получения, не лишенный элементов подгонки, должен служить достаточным предостережением против применения их в каких-либо серьезных расчетах. Можно, однако, рассмотреть вопрос о том, следует ли понимать величину N в выражениях (П5.54), (П5.58) и (П5.61) как полное число электронов в атоме или только во внешней оболочке. В работе Слэтера и Кирквуда [6] было ясно сказано, что N должно быть числом электронов во внешней оболочке, если предположить, что внутренние оболочки не поляризуются заметным образом. Однако в более поздней работе Кирквуда [16] было выдвинуто предположение о том, что под N следует понимать полное число электронов атома. В настоящее время общепризнано, что соображения Кирквуда, которые изложены в этой работе, основанной на применении вариационного метода, неверны и что N следует считать равным числу внешних электронов. С помощью простого рассуждения, вытекающего из рассмотрения выражений (П5.52) и (П5.53), можно показать, почему так должно быть.

Пусть имеется атом с заполненными электронными оболочками в основном состоянии, например атом неона. Одному из его возможных типов возбуждения соответствует переход электрона внешней оболочки на возбужденную орбиту; в этом случае энергии возбуждения $h\nu$ лежат в ультрафиолетовой области. Возможно также возбуждение K -полосы рентгеновского спектра, при котором выбивается электрон из состояния $1s$. В последнем случае энергиям возбуждений отвечает область мягких рентгеновских лучей, и ввиду наличия фактора $(h\nu/Ry)^2$ в знаменателе выражения (П5.52) такие возбуждения будут давать практически пренебрежимый вклад в сумму. Иначе говоря, для произвольного атома в рассматриваемой сумме будут иметь заметную величину те члены, которые соответствуют возбуждению электронов из внешней оболочки (в случае неона — из $2s$ - и $2p$ -оболочек, энергии которых примерно одинаковы). Сумма сил осцилляторов f_{n1} для таких возбуждений в ультрафиолетовой области приблизительно равна числу внешних элект-

тронов, и потому именно это число следует брать в качестве N в выражении (П5.52) и, следовательно, в других формулах данного параграфа.

Мы лишь иным способом сформулировали то очевидное утверждение, что вклад электронной оболочки в поляризуемость быстро уменьшается с уменьшением ее размеров, как было указано в § 3 при рассмотрении поляризуемости водородоподобного атома с атомным номером Z . Тогда было установлено, что поляризуемость пропорциональна $1/Z^4$, или четвертой степени радиуса орбиты. Существует множество других способов показать то же самое, как было отмечено рядом авторов.

Прежде чем закончить обсуждение задачи о поляризуемости и энергии Ван дер Ваальса, необходимо сделать еще два замечания. Во-первых, как было показано в § 3, можно получить точное решение задачи о поляризуемости водорода, так как возмущенная волновая функция равна сумме невозмущенной функции и произведения $\cos\theta$ на функцию r , которую можно строго определить. Оказывается, что подобный подход применим в значительно более общем случае, как было показано Стернхеймером [21]. Он вывел дифференциальные уравнения, аналогичные (П5.23), применительно к общему случаю, в котором точечный заряд ядра Z следует заменить функцией r , соответствующей самосогласованному полю, используемому для описания рассматриваемой волновой функции. Путем численного интегрирования такого дифференциального уравнения удалось найти функции типа v [см. выражение (П5.22)] для многих ионов и с помощью этих функций вычислить величину поляризуемости, вполне удовлетворительно согласующуюся с результатами экспериментальных измерений.

В отношении поляризации орбит, отличных от s -состояний, ситуация оказывается более сложной. Можно показать, что в случае орбиты с заданным значением l постоянное внешнее поле приведет к появлению двух членов возмущения, причем один из них будет соответствовать квантовому числу $l+1$, а другой — квантовому числу $l-1$, как и следовало ожидать ввиду наличия правила отбора по l . Можно вывести радиальные дифференциальные уравнения в отдельности для каждой из появляющихся в результате функций; эти уравнения были решены Стернхеймером. Обобщая результаты для атома с замкнутой электронной оболочкой, мы находим, что, несмотря даже на то, что отдельные электроны не находятся в s -состояниях, тем не менее окончательный результат выглядит так, как будто к невозмущенной волновой функции S -типа, соответствующей замкнутой оболочке, добавляется многоэлектронная волновая функция P -типа, т. е. функция, отвечающая полному орбитальному

квантовому числу $L = 1$ с амплитудой, пропорциональной внешнему полю.

Второе замечание общего характера, которое хотелось бы сделать, связано с тем, что в § 1 мы рассмотрели ряд межатомных сил и сил взаимодействия между молекулами, обусловленных поляризацией атома под действием поля иона или постоянного диполя и обратной реакцией поляризационного поля на создающий его ион или постоянный диполь; эти силы играют важную роль во взаимодействиях между ионами или дипольными молекулами. Дальнейшее обсуждение было полностью посвящено частному случаю поляризации, обусловленной флуктуационными диполями и приводящей к появлению сил притяжения Ван дер Ваальса между атомами с замкнутыми электронными оболочками, иногда называемых дисперсионными силами. Однако взаимодействия других типов важны сами по себе, и обусловленные ими эффекты следует учитывать совместно с рассмотренными выше. Эти эффекты подробно рассмотрены, в частности, в работах Лондона [14, 15] и Маргенау [20]. Они приводят к тому, что полное притяжение Ван дер Ваальса между молекулами, обладающими дипольными моментами, оказывается значительно более сильным, чем в других случаях. Чисто качественное обсуждение этого вопроса можно найти в работе [22]. В этой книге приведена таблица, содержащая данные для большого числа молекул газов, расположенные в порядке увеличения молекулярных объемов, определенных либо по постоянной Ван дер Ваальса B , либо по молекулярному объему в жидкости. Постоянная Ван дер Ваальса A , характеризующая притяжение Ван дер Ваальса, монотонно увеличивается с ростом B , как и следовало ожидать, поскольку мы выяснили, что поляризуемость, от которой зависит это притяжение, увеличивается с возрастанием молекулярных размеров. Имеется, однако, ряд молекул, например H_2O и NH_3 , которые выделяются из общего числа аномально большой величиной притяжения Ван дер Ваальса. В каждом таком случае молекулы обладают большими постоянными дипольными моментами, что вносит добавочный вклад в притяжение Ван дер Ваальса, помимо взаимодействия между составляющими молекулы атомами с замкнутыми оболочками.

ЛИТЕРАТУРА

1. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 1, New York, 1963. (См. перевод: Дж. С л э т е р, Электронная структура молекул, изд-во «Мир», 1965).
2. Slater J. C., Quantum Theory of Atomic Structure, vol. 1, New York, 1960.
3. Sugita Y., Journ. Phys. Rad., 8, 113 (1927).
4. Eisenschitz R., London F., Zs. Phys., 60, 491 (1930).

5. Waller I., *Zs. Phys.*, **38**, 635 (1926).
6. Slater J. C., Kirkwood J. G., *Phys. Rev.*, **37**, 682 (1931).
7. Hasse H. R., *Proc. Cambr. Phil. Soc.*, **27**, 66 (1931).
8. Pauling L., Beach J. Y., *Phys. Rev.*, **47**, 686 (1935).
9. Hirschfelder J. O., Linnett J. W., *Journ. Chem. Phys.*, **18**, 130 (1950).
10. Margenau H., *Phys. Rev.*, **56**, 1000 (1939).
11. Dalgarno A., Lynn N., *Proc. Phys. Soc.*, **A70**, 802 (1957).
12. Slater J. C., *Phys. Rev.*, **32**, 349 (1928).
13. Moore N., *Journ. Chem. Phys.*, **33**, 471 (1960).
14. London F., *Phys. Chem.*, **B11**, 222 (1930).
15. London F., *Trans. Faraday Soc.*, **33**, 8 (1937).
16. Kirkwood J. G., *Zs. Phys.*, **33**, 57 (1932).
17. Vinti J. P., *Phys. Rev.*, **41**, 813 (1932).
18. Гельман Г., *Acta Physicochim. URSS*, **2**, 273 (1935).
19. Unsöld A., *Zs. Phys.*, **43**, 563 (1927).
20. Margenau H., *Rev. Mod. Phys.*, **11**, 1 (1939).
21. Sternheimer R. M., *Phys. Rev.*, **96**, 951 (1954); **107**, 1565 (1957).
22. Slater J. C., *Introduction to Chemical Physics*, New York, 1939, p. 408.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

Силы Ван дер Ваальса: [141, 327, 649—652, 663, 724, 775, 1034, 1071—1073, 1521, 1522, 1899, 1900, 2127, 2566, 2890, 3243, 3428, 3429, 3473, 3573, 3865, 3984, 3985, 4420].

6. ТЕОРЕМА ВИРИАЛА ДЛЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Мы хотим доказать для случая твердого тела равенство (10.5):

$$(\text{Кинетическая энергия}) = -\frac{1}{2} (\text{Потенциальная энергия}) + \frac{3}{2} p v. \quad (\text{П6.1})$$

Здесь p — давление, а v — объем. Возьмем в качестве исходного соотношение (2.37) из т. 1¹⁾, которое имеет следующий вид:

$$(\text{Кинетическая энергия})_{\text{ср}} = -\frac{1}{2} (\text{Потенциальная энергия})_{\text{ср}} - \frac{1}{2} \sum_i (x_i F_{\text{вн. } i})_{\text{ср}}. \quad (\text{П6.2})$$

Здесь x_i представляет собой координату одной из частиц системы вдоль какой-либо оси, а $F_{\text{вн. } i}$ — компонента внешней силы в направлении той же оси. Эта теорема, как мы помним, справедлива для такой системы, в которой все внутренние силы являются кулоновскими, как в атоме, молекуле или твердом теле.

В случае твердого тела конечного объема, находящегося под гидростатическим давлением p , на каждый участок поверхности единичной площади действует сила p , направленная нормально к поверхности внутрь объема тела. Эта сила фактически действует, конечно, со стороны стенок на различные атомы, которые оказываются вблизи рассматриваемой единичной площади. Поэтому сумму по i в (П6.2) можно заменить поверхностным интегралом по поверхности тела. Элементу площади da будет соответствовать вклад в величину $\sum_i x_i F_{\text{вн. } i}$, равный скалярному произведению вектора \mathbf{r} , идущего из начала координат к данному элементу площади (этот сомножитель обусловлен величиной x_i), и внешней силы, действующей на атомы, находящиеся

¹⁾ J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, vol. 1, New York, 1963. (См. перевод: Дж. Слэтер, Электронная структура молекул, изд-во «Мир», 1965.)

поблизости от этой единичной площади, которая равна $-pn da$, где \mathbf{n} — внешняя нормаль к поверхности. Отсюда имеем

$$\sum_i x_i F_{\text{вн. } i} = \int -p(\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) da, \quad (\text{П6.3})$$

где интегрирование проводится по поверхности твердого тела. Поскольку гидростатическое давление p считается однородным, его можно вынести из-под знака интеграла, после чего остается $-p \int (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) da$.

Этот интеграл можно вычислить с помощью теоремы Гаусса — Остроградского. Рассматривая $\mathbf{r} = ix + jy + kz$ как векторную функцию положения, мы найдем $\nabla \cdot \mathbf{r} = 3$. Но интеграл по объему от дивергенции векторной функции равен интегралу по поверхности от нормальной компоненты самой функции. Таким образом,

$$\int \nabla \cdot \mathbf{r} dv = 3v = \int (\mathbf{r} \cdot \mathbf{n}) da, \quad (\text{П6.4})$$

где v — объем. Комбинируя полученное выражение с (П6.3) и (П6.4), получаем

$$\sum_i x_i F_{\text{вн. } i} = -3pv. \quad (\text{П6.5})$$

Подставляя этот результат в (П6.2), сразу приходим к искомому равенству (П6.1).

БИБЛИОГРАФИЯ

Настоящая библиография — самая обширная из всех библиографий, помещенных в томах данной серии. Это обусловлено в основном тем, что сюда включены как экспериментальные, так и теоретические работы, посвященные энергетическим зонам и поверхности Ферми, а также многим связанным с ними вопросам. В огромном большинстве экспериментальных работ этой области развивается теория или проводится сравнение теории с экспериментом, так что теоретик, как и экспериментатор, должен быть знаком с экспериментальной литературой. В библиографии представлены работы по следующим вопросам: колебания решетки, проводимость, оптические свойства, диэлектрическое поведение, энергия связи, задача многих тел в применении к теории твердого тела. Сравнительно немного вопросов останется для библиографии четвертого тома; среди них — магнитные свойства твердых тел, теория поля лигандов, экситоны, поляроны и другие возбуждения. Данная библиография, как и библиография предыдущих томов, содержит не только те статьи и книги, на которые имеются ссылки в тексте, но и большое количество других работ. В основном мы не дублировали ссылки на работы, упомянутые в библиографиях к книгам «Квантовая теория строения атома» и к т. 1 и 2 настоящей монографии.

Библиография состоит из трех частей. Первая часть — список книг; представляется более удобным отделить книги от статей. Затем имеются две хронологически разделенные библиографии статей. В библиографию 1 включены более ранние работы вплоть до 1946 г.; в библиографии 2 собраны более поздние, начиная с 1947 г. и до настоящего времени. Наиболее полно охвачены работы шестидесятых годов. Список экспериментальных работ далеко не полон, поскольку огромное количество литературы делает совершенно невозможным перечисление всех статей.

Перекрестные ссылки даны для того, чтобы присоединить имена не первых авторов, являющихся, однако, авторами других работ и упомянутых в другом месте алфавитного списка. Для нахождения статей, упомянутых в тексте, указаны номера параграфов, так что библиография может одновременно служить указателем цитированной литературы и имен.

1. Aigrain P. R., Coelho R. J., Ascarelli G., *Electronic Processes in Solids*, Cambridge, New York, 1960.
2. Ахизер А. И., Берестецкий В. Б., *Квантовая электродинамика*, М., 1959.
3. Anderson P. W., *Concepts in Solids*, New York, 1963.
4. Васон G. E., *Neutron Diffraction*, 2d ed., New York, 1962. (См. перевод: Дж. Бэкон, *Дифракция нейтронов*, ИЛ, 1957.)
5. Вак Т. А. (ed.), *Phonons and Phonon Interactions*, New York, 1964.
6. Barrett C. S., *Structure of Metals*, 2d ed., New York, 1952. (См. перевод: Ч. С. Баррет, *Структура металлов. Кристаллографические методы, принципы и данные*, М., 1948.)

7. В л а к е т о г е J. S., Semiconductor Statistics, New York, 1962. (См. перевод: Д. Блекмор, Статистика электронов в полупроводниках, изд-во «Мир», 1964.)
8. Б о н ч - Б р у е в и ч В. Л., Тяблнков С. В., Метод функций Грина в статистической механике, М., 1961.
9. В о г н М., Dynamik der Kristallgitter, Leipzig, 1915. (См. перевод: М. Борн, М. Геллерт-Майер, Теория твердого тела, М.—Л., 1938.)
10. В о г н М., Problems of Atomic Dynamics, Cambridge, 1926.
11. В о г н М., Optik, Ann Arbor, Mich., 1943. (См. перевод: М. Борн, Оптика, Харьков — Киев, 1937.)
12. В о г н М., W o l f E., Dynamical Theory of Cristal Lattices, New York, 1954. (См. перевод: М. Борн, Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, 1958.)
13. В о г н М., W o l f E., Principles of Optics, 2nd rev. ed., New York, 1965. (Готовится русский перевод.)
14. B r a g g W. H., B r a g g W. L., X-rays and Crystal Structure, 5th ed., 1925. (См. перевод: У. Г. Брегг, У. Л. Брегг, Рентгеновские лучи и строение кристаллов, М.—Л., 1929.)
15. B r a g g W. H., The Cristalline State, New York, 1934. (См. перевод: У. Г. Брегг, Кристаллическое состояние, М.—Л., 1938.)
16. Brillouin L., Les Tenseurs on mécanique et en élasticité, Paris, 1938.
17. Brillouin L., Wave Propagation in Periodic Structures, New York, 1953. (См. перевод: Л. Бриллюэн, Распространение волн в периодических структурах, ИЛ, 1959.)
18. B r o u t R., Phase Transitions, New York, 1965. (См. перевод: Р. Браут, Фазовые переходы, изд-во «Мир», 1967.)
19. P u b e R. H., Photoconductivity of Solids, New York, 1960. (См. перевод: Р. Бьюб, Фотопроводимость твердых тел, ИЛ, 1962.)
20. C a d y W. G., Piezoelectricity, New York, 1946. (См. перевод: У. Кэди, Пьезоэлектричество и его практические применения, ИЛ, 1949.)
21. C a l l a w a y J., Energy Band Theory, New York, 1964. (Готовится русский перевод.)
22. C a l l e n H. В., Thermodynamics, New York, 1962.
23. C o h e n E. G. R. (ed.), Fundamental Problems in Statistical Mechanics, New York, 1962.
24. C o m p t o n A. H., Allison S. K., X-rays in Theory and Experiment, Princeton, N. J., 1935. (См. перевод: А. Комптон, С. К. Аллисон, Рентгеновские лучи. Теория и эксперимент, М.—Л., 1941.)
25. C u r i e D., Luminescence in Crystals, New York, 1960. (См. перевод: Д. Кюри, Люминесценция кристаллов, ИЛ, 1961.)
26. D a m p i e r W. C., History of Science, New York, 3d ed., 1942.
27. D a u d e l R., L e f e b v r e R., M o s e r C., Quantum Chemistry, New York, 1959.
28. D e b y e P., Polare Molekeln, Leipzig, 1929. (См. перевод: П. Дебай, Полярные молекулы, М.—Л., 1931.)
29. D e k k e r A. J., Solid State Physics, Englewood Cliffs, N. J. 1957.
30. D r a b b l e J. R., G o l d s m i d H. J., Thermal Conduction in Semiconductors, New York, 1961. (См. перевод: Дж. Драбл, Г. Голдсמיד, Теплопроводность полупроводников, ИЛ, 1963.)
31. D r u d e P., Lehrbuch der Optik, Leipzig, 1900. (См. перевод: П. Друде, Оптика, М.—Л., 1935.)
32. F ö r s t e r l i n g K., Lehrbuch der Optik, Leipzig, 1928.
33. F o w l e r R. H., Statistical Mechanics, 2d ed., 1936, reprinted, 1955.
34. F o w l e r R. H., G u g g e n h e i m E. A., Statistical Thermodynamics, 2d ed. 1960. (См. перевод: Р. Фаулер, Э. А. Гуггенгейм, Статистическая термодинамика, ИЛ, 1949.)

35. Frauenfelder H. (ed.), The Mössbauer Effect, New York, 1962. (См. перевод в сборнике: «Эффект Мёссбауэра», ИЛ, 1962.)
36. Friedel J., Guinier A. (eds.), Metallic Solid Solutions, New York, 1963.
37. Fröhlich H., Elektronentheorie der Metalle, Berlin, 1936.
38. Fröhlich H., Theory of Dielectrics, New York, 1949. (См. перевод: Г. Фрелих, Теория диэлектриков, ИЛ, 1960.)
39. Gibson A. F., Burgess R. E., Aigrain P. (eds.), Progress in Semiconductors, annual volumes, London, 1956.
40. Gombas P., Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Vienna, 1949. (См. перевод: П. Гомбаш, Статистическая теория атома и ее применение, ИЛ, 1951.)
41. Griem H. R., Plasma Spectroscopy, New York, 1964.
42. Griffith J. S., The Theory of Transition-metal Ions, New York, 1961.
43. Grivet P., Bloembergen N. (eds), Quantum Electronics, vols. 1 and 2, New York, 1964.
44. Hannay N. B. (ed.), Semiconductors, New York, 1959. (См. перевод: Полупроводники, под ред. Н. Б. Хеннея, ИЛ, 1962.)
45. Harrison W. A., Webb M. B. (eds), The Fermi Surface, New York, 1960.
46. Heikes R. R., Ure R. W., Jr., Thermoelectricity, New York, 1961.
47. Henisch H. K., Rectifying Semiconductor Contacts, New York, 1957. (См. перевод 1-го изд.: Г. Хениш, Полупроводниковые выпрямители, ИЛ, 1951.)
48. Henisch H. K., Electroluminescence, New York, 1962. (См. перевод: Г. К. Хениш, Электролюминесценция, изд-во «Мир», 1964.)
49. Herman F., Skillman S., Atomic Structure Calculation, Englewood Cliffs, N. J., 1963.
50. Hill T. L., Statistical Mechanics, New York, 1956. (См. перевод: Т. Хилл, Статистическая механика. Принципы и избранные приложения, ИЛ, 1960.)
51. Hilsom C., Rose-Innes A. C., Semiconducting III—V Compounds, New York, 1961. (См. перевод: К. Хилсум, Роуз-Иннс, Полупроводники типа А^{III}В^V, ИЛ, 1963.)
52. Huang Kerson, Statistical Mechanics, New York, 1963. (См. перевод: Хуанг Керзон, Статистическая механика, изд-во «Мир», 1966.)
53. Hume-Rothery W., The Metallic State, New York, 1931.
54. Huntington H. B., The Elastic Constants of Crystals, New York, 1958.
55. «Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids», International Atomic Energy Agency, Vienna, Vienna Conf., 1961, Chalk River Conf., vol. 1, 1962; vol. 2, 1963.
56. Иоффе А. Ф., Физика полупроводников, изд-во АН СССР, М.—Л., 1957.
57. James R. W., The Optical Principles of the Diffraction of X-rays, London, 1948. (См. перевод: Р. Джеймс, Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, ИЛ, 1950.)
58. Jona F., Shirane G., Ferroelectric Crystals, New York, 1963. (См. перевод: Ф. Иона, Д. Ширане, Сегнетоэлектрические кристаллы, изд-во «Мир», 1965.)
59. Kallmann H., Silver M. (eds.), Electrical Conductivity in Organic Solids, New York, 1961.
60. Kittel C., Introduction to Solid-state Physics, 2d ed., 1956. (См. перевод: Ч. Киттель, Введение в физику твердого тела, М., 1957.)
61. Kittel C., Quantum Theory of Solids, New York, 1963. (См. перевод: Ч. Киттель, Квантовая теория твердых тел, М., 1967.)

62. Kline M., Kay J. W., *Electromagnetic Theory and Geometrical Optics*, New York, 1965.
63. Кнох R. S., Gold A., *Symmetry in the Solid State*, New York, 1964. (См. перевод: Р. Нокс, А. Голд, Симметрия в физике твердого тела, изд-во «Наука», 1968.)
64. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., *Статистическая физика*, М., 1960.
65. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., *Электродинамика сплошных сред*, М., 1959.
66. Lewis G. N., Randall M., *Thermodynamics*, 2d ed., rev. by K. S. Pitzer and L. Brewer, New York, 1961.
67. Lorentz H. A., *The Theory of Electrons*, 3d ed., New York, 1923. (См. перевод: Г. А. Лорентц, Теория электронов и ее применение к явлениям света и теплового излучения, М., 1956.)
68. MacDonald D. K. C., *Thermoelectricity*, New York, 1962.
69. Maradudin A. A., Montroll E. W., Weiss G. W., *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, New York, 1963. (См. перевод: А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс, Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, изд-во «Мир», 1965.)
70. Mason W. P., *Physical Acoustics and the Properties of Solids*, Princeton, N. J., 1958.
71. Mayer J. E., Mayer M. G., *Statistical Mechanics*, New York, 1940. (См. перевод: Дж. Майер, М. Генперт-Майер, Статистическая механика, ИЛ, 1952.)
72. Megaw H. D., *Ferroelectricity in Crystals*, London, 1957.
73. Meyer C. F., *The Diffraction of Light, X-rays and Material Particles*, 2d ed., Ann Arbor, Mich., 1949.
74. Moll J. J., *Physics of Semiconductors*, New York, 1964.
75. Morse P. M., *Thermal Physics*, New York, 1964.
76. Mott N. F., Massey H. S., *Theory of Atomic Collisions*, New York, 1933. (См. перевод: Н. Ф. Мотт, Г. Месси, Теория атомных столкновений, ИЛ, 1951.)
77. Mott N. F., Jones H., *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, Oxford, New York, 1936.
78. Mott N. F., Gurney R. W., *Electronic Processes in Ionic Crystals*, 2d ed., 1948. (См. перевод: Н. Ф. Мотт, Р. В. Герни, Электронные процессы в ионных кристаллах, ИЛ, 1950.)
79. Nozières P., *Theory of Interacting Fermi Systems*, New York, 1963.
80. Paul W., Warschauer D. (eds.), *Solids under Pressure*, New York, 1963. (См. перевод: Твердые тела под высоким давлением, под ред. В. Пола, Д. Варшауэра, изд-во «Мир», 1966.)
81. Peierls R., *Quantum Theory of Solids*, New York, 1955. (См. перевод: Р. Пайерлс, Квантовая теория твердых тел, ИЛ, 1956.)
82. Пекар С. И., *Исследования по электронной теории кристаллов*, М. — Л., 1951.
83. Percus J. K. (ed.), *The Many-body Problem*, New York, 1963.
84. Pines D., *The Many-body Problem*, New York, 1961. (См. перевод 1-го изд.: Д. Пайнс, Проблема многих тел, ИЛ, 1956.)
85. Pines D., *Elementary Excitations in Solids*, New York, 1963. (См. перевод: Д. Пайнс, Элементарные возбуждения в твердых телах, изд-во «Мир», 1965.)
86. Пинскер З. Г., *Дифракция электронов*, М. — Л., 1949.
87. Pippard A. B., *Elements of Classical Thermodynamics*, New York, 1960.
88. Prigogine I., *Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes*, 1st ed., New York, 1955, 2d ed., 1961. (См. перевод 1-го изд.:

- И. Пригожин, Введение в термодинамику необратимых процессов ИЛ, 1960.)
89. Prigogine I., Non-equilibrium Statistical Mechanics, New York, 1962. (См. перевод: И. Пригожин, Неравновесная статистическая механика, изд-во «Мир», 1964.)
 90. Raimes S., The Wave Mechanics of Electrons in Metals, Amsterdam, 1961.
 91. Раунор G. V., Introduction to the Theory of Metals, London, 1943.
 92. Rhodes R. G., Imperfections and Active Centers in Semiconductors, New York, 1964.
 93. Rose A., Concepts in Photoconductivity and Allied Problems, New York, 1963. (См. перевод: А. Роуз, Основы теории фотопроводимости, изд-во «Мир», 1966.)
 94. Rosenberg H. M., Low Temperature Solid State Physics, Oxford, New York, 1963.
 95. Sachs M., Solid State Theory, New York, 1963.
 96. Seitz F., The Modern Theory of Solids, New York, 1940. (См. перевод: Ф. Зейтц, Современная теория твердого тела, М.—Л., 1949.)
 97. Seitz F., The Physics of Metals, New York, 1943. (См. перевод: Ф. Зейтц, Физика металлов, М.—Л., 1947.)
 98. Seitz F., Imperfections in Nearly Perfect Crystals, New York, 1952.
 99. Seitz F., Turnbull D. (eds), Solid State Physics. frequent volumes, starting 1955, New York.
 100. Semiconducting Materials, London, 1951. (См. перевод: Полупроводниковые материалы, ИЛ, 1954.)
 101. Semiconductor Conference, Proceedings, Prague, 1960, New York, 1961.
 102. Semiconductor Conference, Proceedings, Exeter, 1962, London, 1962.
 103. Sette D. (ed.), Dispersion and Absorption of Sound by Molecular Processes, New York, 1963.
 104. Shockley W., Electrons and Holes in Semiconductors, Princeton, N. J., 1950. (См. перевод: В. Шокли, Теория электронных полупроводников, ИЛ, 1953.)
 105. Slater J. C., Introduction to Chemical Physics, New York, 1939.
 106. Slater J. C., Frank N. H., Electromagnetism, New York, 1947.
 107. Slater J. C., Quantum Theory of Matter, New York, 1951.
 108. Slater J. C., Quantum Theory of Atomic Structure, vols. 1 and 2, New York, 1960.
 109. Slater J. C., Quantum Theory of Molecules and Solids, vols. 1 and 2, New York, 1963 and 1965.
 110. Smidt J. (ed.), Magnetic and Electric Resonance and Relaxation, Amsterdam, 1963.
 111. Smith R. A., The Physical Principles of Thermodynamics, London, 1952.
 112. Smith R. A., Semiconductors, New York, 1959. (См. перевод: Р. Смит, Полупроводники, ИЛ, 1962.)
 113. Smith R. A., Wave Mechanics of Crystalline Solids, New York, 1961.
 114. Smith R. A. (ed.), Semiconductors, New York, 1963.
 115. Sommerfeld A., Optics, New York, 1964. (См. перевод: А. Зоммерфельд, Оптика, ИЛ, 1953.)
 116. Stone J. M., Radiation and Optics, New York, 1963.
 117. Suchet J. P., Physique des semiconducteurs, Paris, 1961.
 118. Таус J., Photo- and Thermoelectric Effects in Semiconductors, New York, 1962. (См. перевод: Я. Таус, Фото- и термоэлектрические явления в полупроводниках, ИЛ, 1962.)
 119. Тер Хаар D., Introduction to the Physics of Many-body Systems, New York, 1958. (См. перевод: Д. Тер Хаар, Введение в физику систем многих частиц, ИЛ, 1961.)

120. Theory of Alloy Phases, American Society for Metals. 1956. (См. перевод: Теория фаз в сплавах, М., 1961.)
121. Thirring W. E., Principles of Quantum Electrodynamics, New York, 1958. (См. перевод: В. Е. Тирринг, Принципы квантовой электродинамики, М., 1964.)
122. Thomson G. P., Cochrane W., Theory and Practice of Electron Diffraction, New York, 1939.
123. Thouless D. J., The Quantum Mechanics of Many-body Systems, New York, 1961. (См. перевод: Д. Таулес, Квантовая механика систем многих частиц, ИЛ, 1963.)
124. Tolman R. C., The Principles of Statistical Mechanics, New York, 1938.
125. Townes C. H., Schawlow A. L., Microwave Spectroscopy, New York, 1955. (См. перевод: Ч. Таунс, А. Шавлов, Радиоспектроскопия, ИЛ, 1959.)
126. Townes C. H. (ed.), Quantum Electronics, New York, 1960.
127. Цидильковский И. М., Терромагнитные явления в полупроводниках, М., 1960.
128. Van Arkel A. E., Molecules and Crystals in Inorganic Chemistry, New York, 1949.
129. Van Hove L., Hugenholtz N. M., Howland L. P., Quantum Theory of Many-particle Systems, New York, 1961.
130. Voigt W., Lehrbuch der Kristallphysik, Leipzig, 1910.
131. Wannier G. H., Elements of Solid State Theory, New York, 1959.
132. Wilson A. H., The Theory of Metals, 2d ed., New York, 1953. (См. перевод: А. Вильсон, Квантовая теория металлов, М.—Л., 1941.)
133. Wilson A. H., Semiconductors and Metals, New York, 1939.
134. Wilson A. H., Thermodynamics and Statistical Mechanics, New York, 1960.
135. Wilson E. B., Jr., Decius J. C., Cross P. C., Molecular Vibrations, New York, 1955. (См. перевод: Е. Вильсон, Дж. Дешиус, П. Кросс, Теория колебательных спектров молекул, ИЛ, 1960.)
136. Wooster W. A., Diffuse X-ray Reflection from Crystals, New York, 1962. (См. перевод: У. А. Вустер, Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах, ИЛ, 1963.)
137. Ziman J. M., Electrons and Phonons, the Theory of Transport Phenomena in Solids, New York, 1960. (См. перевод: Дж. Займан, Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах, ИЛ, 1962.)
138. Ziman J. M., Electron in Metals, London, 1963.
139. Ziman J. M., Principles of the Theory of Solids, New York, 1964. (См. перевод: Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, изд-во «Мир», 1966.)

1. Статьи до 1946 г.

140. Ахиезер А., Journ. Phys. USSR, 1, 277 (1939). (Гл. 3, § 9)
О поглощении звука в твердых телах.
141. Axilrod В. М., Teller E., Journ. Chem. Phys., 11, 299 (1943). (Приложение 5, § 7.)
Взаимодействие вандерваальсового типа между тремя атомами.
142. Vardeem J. Phys. Rev., 49, 653 (1936).
Теория работы выхода. II. Поверхностный двойной слой.
143. Vardeem J., Phys. Rev., 50, 1098 (1936).
Электронный обмен в теории металлов.
144. Vardeem J., Phys. Rev., 52, 688 (1937).
Проводимость одновалентных металлов.
145. Vardeem J., Journ. Chem. Phys., 6, 367 (1938). (Гл. 10, § 4.)
Уточненный расчет энергий металлических Li и Na.

146. Vardeen J., Journ. Chem. Phys., **6**, 372 (1938). (Гл. 10, § 4.)
Сжимаемости щелочных металлов.
147. Vardeen J., Van Vleck J. H., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., **25**, 82 (1939).
Ток электронов в металлах в блоховском приближении «сильной связи».
148. Vardeen J. (см. [867]).
149. Wagner R. B., Brattain R. B., Seitz F., Phys. Rev., **48**, 582 (1935). (Гл. 5, § 5; гл. 8, § 6.)
О структуре и интерпретации спектров инфракрасного поглощения кристаллов.
150. Waeger S. H., Journ. Chem. Phys., **6**, 403 (1938).
Плотность энергетических состояний в твердом теле.
151. Beck G., Zs. Phys., **38**, 144 (1926). (Гл. 1, § 5.)
Эффект Комптона и квантовая механика.
152. Beck G. Zs. Phys., **41**, 443 (1927).
К теории фотоэффекта.
153. Bethe H., Naturwiss., **15**, 786 (1927).
О рассеянии электронов на кристаллах.
154. Bethe H., Naturwiss., **16**, 333 (1928).
Рассеяние электронов на кристаллах.
155. Bethe H., App. Phys., **87**, 55 (1928).
Теория дифракции электронов в кристаллах.
156. Bethe H., Zs. Phys., **54**, 703 (1929).
О прохождении катодных лучей через электрические поля решетки.
157. Bethe H., App. Phys., **5**, 325 (1930).
К теории прохождения быстрых частиц через вещество.
158. Bethe H. (см. [791]).
159. Власктап М., Zs. Phys., **86**, 421 (1933); **112**, 256 (1939). (Гл. 8, § 5.)
Тонкая структура остаточных лучей.
160. Власктап М., Proc. Roy. Soc., **A148**, 365, 384 (1935). (Гл. 8, § 5.)
К теории теплоемкости кристаллов. I. Решеточная и континуальная теории. II. О колебательном спектре кубических решеток и его приложении к теплоемкости кристаллов.
161. Власктап М., Proc. Roy. Soc., **A149**, 117, 126 (1935). (Гл. 8, § 5.)
К теории теплоемкости кристаллов. III. О существовании псевдо- T^3 диапазонов в температурной зависимости теплоемкости кристалла. IV. О расчете теплоемкости кристаллов из данных по упругости.
162. Власктап М., Phil. Trans. Roy. Soc., **A236**, 103 (1936). (Гл. 8, § 5.)
Поглощение полярных кристаллов в инфракрасной области.
163. Власктап М., Proc. Roy. Soc., **A159**, 416 (1937). (Гл. 8, § 5.)
О колебательном спектре трехмерной решетки.
164. Власктап М., Proc. Camb. Phil. Soc., **33**, 94 (1937). (Гл. 8, § 5.)
Некоторые свойства колебательного спектра решетки.
165. Власктап М., Proc. Camb. Phil. Soc., **33**, 380 (1937). (Гл. 8, § 5.)
Влияние температуры на отражение рентгеновских лучей.
166. Власктап М., Proc. Roy. Soc., **A164**, 62 (1938). (Гл. 8, § 5.)
Аномальные колебательные спектры.
167. Власктап М., Proc. Roy. Soc., **A166**, 1 (1938). (Гл. 3, § 11.)
О диамагнитной восприимчивости висмута.
168. Власктап М., Proc. Roy. Soc., **A173**, 68 (1939).
Интенсивности дифракционных колец электронов.
169. Власктап М., Rep. Progr. Phys., **8**, 11 (1941). (Гл. 8, § 5.)
Теория теплоемкости твердых тел.
170. Власктап М. (см. [808]).
171. Bleick W. E., Journ. Chem. Phys., **2**, 160 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Энергии решеток галоидов аммония и прогонное средство аммиака.

172. Bleick W. E., Mayer J. E., Jour. Chem. Phys., 2, 252 (1934).
(Гл. 10, § 4.)
Потенциал взаимного отталкивания замкнутых оболочек.
173. Bloch F., Zs. Phys., 52, 555 (1928). (Гл. 1, § 5.)
О квантовой механике электронов в кристаллических решетках.
174. Bloch F., Zs. Phys., 53, 216 (1929).
О восприимчивости и изменении сопротивления металлов в магнитном поле.
175. Bloch F., Zs. Phys., 57, 545 (1929). (Гл. 10, § 2.)
Замечания к электронной теории ферромагнетизма и электропроводности.
176. Bloch F., Zs. Phys., 59, 208 (1930). (Гл. 1, § 5.)
О законе электрического сопротивления при низких температурах.
177. Bloch F., Leipziger Vorträge, 1930, S. 69. (Гл. 11, § 7.)
О взаимодействии электронов в металлах.
178. Bloch F., Phys. Zs., 32, 881 (1931).
Волномеханическая трактовка фотоэффекта и электропроводности.
179. Bloch F., Ann. Phys., 16, 285 (1933).
О торможении быстрых частиц при прохождении через вещество.
180. Bloch F., Jour. Phys. Rad., 4, 486 (1933).
Замечание о законе сохранения в теории металлов.
181. Bloch F., Zs. Phys., 81, 363 (1933).
Тормозная способность атомов с несколькими электронами.
182. Bloch F., Phys. Rev., 46, 674 (1934). (Гл. 1, § 5.)
К теории комптоновской линии.
183. Bloch F., Helv. Phys. Acta, 7, 386 (1934).
Некогерентное рентгеновское излучение и колебания плотности вырожденного ферми-газа.
184. Блохинцев Д., Nordheim L., Zs. Phys., 84, 168 (1933). (Гл. 2, § 4.)
К теории аномального магнитного и термоэлектрического эффектов в металлах.
185. Блохинцев Д. (см. [798]).
186. Vogt M., von Kärgmäp T., Phys. Zs., 13, 297 (1912). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 5.)
О колебаниях пространственных решеток.
187. Vogt M., von Kärgmäp T., Phys. Zs., 14, 15 (1913). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 5.)
К теории теплоемкости.
188. Vogt M., von Kärgmäp T., Phys. Zs., 14, 65 (1913). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 5.)
О распределении собственных колебаний в точечных решетках.
189. Vogt M., Landé A., Sitzber. Preuss. Akad. Wiss., 1918, S. 1048. (Гл. 9, § 1; гл. 10, § 4.)
О микроскопическом расчете свойств кристаллов с помощью атомной модели Бора.
190. Vogt M., Landé A., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 20, 202 (1918). (Гл. 9, § 1; гл. 10, § 4.)
Кристаллическая решетка и атомная модель Бора.
191. Vogt M., Landé A., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 20, 210 (1918). (Гл. 9, § 1; гл. 10, § 4.)
О расчете сжимаемости идеальных кристаллов из теории решетки.
192. Vogt M., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 20, 224 (1918). (Гл. 10, § 4.)
Расчет постоянных решетки.
193. Vogt M., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 20, 230 (1918). (Гл. 10, § 4.)
О кубической атомной модели.

194. Vogt M., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 21, 13 (1919). (Гл. 10, § 4.)
Термохимические приложения теории решетки.
195. Vogt M., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 21, 533 (1919). (Гл. 10, § 4.)
Об электрической природе сил сцепления твердых тел.
196. Vogt M., Vogt and E., Ann. Phys., 62, 218 (1920).
К теории решетки цинковой обманки.
197. Vogt M., Zs. Phys., 6, 140 (1921). (Гл. 8, § 5.)
О колебаниях конечной амплитуды в механической системе и об их квантовании.
198. Vogt M., Zs. Phys., 7, 124 (1921). (Гл. 8, § 5.)
К термодинамике кристаллической решетки.
199. Vogt M., Brody E., Zs. Phys., 6, 132 (1921); 8, 205 (1922). (Гл. 8, § 5.)
О теплоемкости твердых тел при высоких температурах.
200. Vogt M., Brody E., Zs. Phys., 11, 327 (1922). (Гл. 8, § 5.)
К термодинамике кристаллической решетки.
201. Vogt M., Epz. Math. Wiss., V3, 527 (1923). (Гл. 8, § 5.)
Атомная теория твердого состояния (динамика кристаллической решетки).
202. Vogt M., Zs. Phys., 37, 863 (1926).
К квантовой механике процессов столкновений.
203. Vogt M., Zs. Phys., 38, 803 (1926).
Квантовая механика процессов столкновений.
204. Vogt M., Gott. Nachr., 146 (1926).
К волновой механике процессов столкновений.
205. Vogt M., Mayer J. E., Zs. Phys., 75, 1 (1932). (Гл. 9, § 2; гл. 10, § 4.)
К теории ионных решеток.
206. Vogt M., Görpert-Mayer M., в книге «Handbuch der Physik», 2te Hrg., Bd. 24/2, Berlin, 1933, S. 623. (Гл. 8, § 6; гл. 10, § 4.) (См. перевод: М. Борн, М. Гепперт-Майер, Динамическая теория кристаллических решеток, М., 1938.)
207. Vogt M., Thompson J. H. C., Proc. Roy. Soc., A147, 594 (1934).
Спектр частот решетки полярного кристалла.
208. Vogt M., Proc. Camb. Phil. Soc., 36, 160 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Об устойчивости кристаллических решеток.
209. Vogt M., Fürth R., Proc. Camb. Phil. Soc., 36, 454 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Устойчивость кристаллических решеток. III. Попытка рассчитать сопротивление кубической решетки на разрыв с помощью чисто статических представлений.
210. Vogt M., Misra R. D., Proc. Camb. Phil. Soc., 36, 466 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Об устойчивости кристаллических решеток. IV.
211. Vogt M., Sargison K., Proc. Roy. Soc., A179, 69 (1941). (Гл. 7, § 3.)
Влияние тепловых колебаний на рассеяние рентгеновских лучей.
212. Vogt M., Proc. Roy. Soc., A180, 397 (1942).
Влияние тепловых колебаний на рассеяние рентгеновских лучей.
213. Vogt M., Lonsdale K., Smith H., Nature, 149, 402 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Квантовая теория и диффузное отражение рентгеновских лучей.
214. Vogt M., Proc. Phys. Soc., 54, 362 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Динамика решетки и рассеяние рентгеновских лучей.
215. Vogt M., Phys. Rev., 61, 377 (1942). (Гл. 8, § 1.)
О теории температурного диффузного рассеяния.

216. Vogt M., Rep. Progr. Phys., **9**, 294 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Теоретическое исследование связи между динамикой кристалла и рассеянием рентгеновских лучей.
217. Vogt M., Proc. Camb. Phil. Soc., **38**, 82 (1942); **40**, 262 (1942). (Гл. 10, § 4.)
Об устойчивости кристаллических решеток. IX. Ковариантная теория деформаций решетки и устойчивость некоторых гексагональных решеток.
218. Vogt M., Bradburn M., Proc. Camb. Phil. Soc., **39**, 104 (1943) (Гл. 8, § 6.)
Термодинамика кристаллических решеток. II. Расчет некоторых решеточных сумм, встречающихся в термодинамике.
219. Vogt M. (см. [1169]).
220. Bradburn M., Proc. Camb. Phil. Soc., **39**, 113 (1943). (Гл. 10, § 4.)
Термодинамика кристаллических решеток. III. Уравнение состояния гранецентрированной кубической решетки.
221. Bradburn M. (см. [218]).
222. Bragg W. H., Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A88**, 428 (1913); **A89**, 246 (1913). (Гл. 6, § 1.)
Отражение рентгеновских лучей кристаллами.
223. Bragg W. H., Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A89**, 277 (1913).
Структура алмаза.
224. Bragg W. H., Phys. Zs., **14**, 472 (1913).
Отражение рентгеновских лучей кристаллами.
225. Bragg W. H., Phil. Mag., **27**, 881 (1914).
Интенсивность отражения рентгеновских лучей кристаллами.
226. Bragg W. H., Phil. Trans. Roy. Soc., **A215**, 253 (1915). (Гл. 6, § 1.)
Рентгеновские лучи и кристаллическая структура.
227. Bragg W. L., Proc. Camb. Phil. Soc., **17**, 43 (1913). (Гл. 6, § 1.)
Дифракция коротких электромагнитных волн в кристалле.
228. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A89**, 248 (1913).
Структура некоторых кристаллов, определенная по дифракции рентгеновских лучей в них.
229. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A89**, 468 (1913).
Исследование кристаллов с помощью рентгеновского спектрометра.
230. Bragg W. L., Phys. Zs., **15**, 77 (1914).
Замечание об интерференционных картинах гемиздрических кристаллов.
231. Bragg W. L., James R. W., Bosanquet C. H., Phil. Mag., **41**, 309 (1921); **II**, **42**, 1 (1921). (Гл. 8, § 6.)
Интенсивность отражения рентгеновских лучей кристаллами каменной соли.
232. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A105**, 370 (1924). (Гл. 4, § 4.)
Коэффициенты отражения в кальците и арагоните.
233. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A106**, 346 (1924). (Гл. 4, § 4.)
Влияние расположения атомов на коэффициент отражения.
234. Bragg W. L., Phil. Mag., **50**, 306 (1925).
Интерпретация измерений интенсивности при исследовании структуры кристаллов рентгеновскими методами.
235. Bragg W. L., Proc. Roy. Soc., **A123**, 537 (1929). (Гл. 6, § 1.)
Определение параметров кристаллических структур с помощью разложений Фурье.
236. Bragg W. L., West J., Zs. Krist., **69**, 118 (1929).
Метод определения кристаллических структур с многими параметрами при помощи рентгеновских лучей.
237. Bragg W. L., Zs. Krist., **70**, 475 (1929).
Оптический метод представления результатов рентгеновских исследований.

238. Bragg W. L., Williams E. J., Proc. Roy. Soc., A145, 699 (1934).
Влияние теплового возбуждения на расположение атомов в сплавах.
239. Bragg W. L. (см. [222]).
240. Bridgman P. W., Rev. Mod. Phys., 7, 1 (1935).
Теоретически интересные аспекты явлений при высоких давлениях.
241. Brillouin L., Compt. Rend., 158, 1331 (1914); Ann. de Phys., 17, 88 (1922). (Гл. 1, § 5; гл. 7, § 1; гл. 8, § 1.)
Влияние теплового возбуждения на рассеяние света и рентгеновских лучей в однородном прозрачном теле.
242. Brillouin L., Compt. Rend., 191, 198 (1930); Journ. Phys. Rad., 1, 377 (1930).
Свободные электроны в металлах и роль брегговского отражения.
243. Brillouin L., Journ. Phys. Rad., 7—3, 565 (1932); 7—4, 1 (1933).
Свободные электроны в кристаллической решетке, волновое уравнение и магнитные свойства, самосогласованные поля и металлические электроны.
244. Brillouin L., Journ. Phys. Rad., 7—4, 333 (1933).
Самосогласованное поле для связанных электронов, сверхпроводимость.
245. Brillouin L., Helv. Phys. Acta, 7 (Suppl. 2), 33 (1934).
Основы электронной теории металлов и метод самосогласованного поля.
246. Brillouin L., Journ. Phys. Rad., 7—5, 413 (1934).
Самосогласованное поле Фока для электронов в металле.
247. Brillouin L., Actualités Sci. et Ind., 89 (1934).
Электропроводность и теплопроводность металлов.
248. Brillouin L., Actualités Sci. et Ind., 160 (1934). (Гл. 10, § 1 и 2.)
Атом Томаса — Ферми и метод самосогласованного поля.
249. Brillouin L., Helv. Phys. Acta, 7 (Suppl. 2), 47 (1934).
Флуктуации тока в проводнике.
250. Brillouin L., Journ. Phys. Rad., 7—6, 185 (1935). (Гл. 8, § 5.)
Распространение волн в волновой механике; случай упругих волн.
251. Brillouin L., Journ. Phys. Rad., 7—7, 153 (1936). (Гл. 8, § 5.)
Удельная теплоемкость и структура жидкости.
252. Brillouin L., Journ. Phys. Rad., 7—7, 401 (1936). (Гл. 8, § 5.)
Теория матриц и распространение волн.
253. Broch E. K., Proc. Cambr. Phil. Soc., 33, 485 (1937).
Спектр нормальных колебаний линейных ионных решеток.
254. Brockway L. O., Rev. Mod. Phys., 8, 231 (1936).
Дифракция электронов от газовых молекул.
255. Brück H., Zs. Phys., 51, 707 (1928). (Гл. 10, § 4.)
О волномеханическом расчете сил решетки и об определении размеров ионов, сжимаемостей и энергий решеток простых солей.
256. Buckingham R. A., Proc. Roy. Soc., A160, 94 (1937).
Квантовая теория поляризации атомов.
257. Burkhardt G., Ann. d. Phys., 26, 567 (1936). (Гл. 1, § 5.)
О форме комптоновской линии.
258. Casimir H. B. G., Gerritsen A. N., Physica, 8, 1007 (1940). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Электрическое сопротивление монокристаллов висмута в магнитном поле.
259. Cernuschi F., Proc. Cambr. Phil. Soc., 32, 276 (1936).
Элементарная теория критического поля в диэлектрике.
260. Chartan S., Torring J., Morrill J., Proc. Roy. Soc., A111, 25 (1926). (Гл. 10, § 4.)
Об электростатической потенциальной энергии и ромбоэдрическом угле кристаллов карбонатов и нитратов типа кальцита.

261. Compton A. H., *Nature*, **95**, 343 (1915).
Распределение электронов в атомах.
262. Compton A. H., *Phys. Rev.*, **9**, 29 (1917).
Интенсивность рентгеновского отражения и распределение электронов в атомах.
263. Compton A. H., *Phys. Rev.*, **21**, 483 (1923). (Гл. 1, § 5.)
Квантовая теория рассеяния рентгеновских лучей легкими элементами
264. Compton A. H., *Phys. Rev.*, **22**, 409 (1923).
Спектр рассеянных рентгеновских лучей.
265. Compton A. H., *Phil. Mag.*, **45**, 1121 (1923).
Полное отражение рентгеновских лучей.
266. Compton A. H., *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S.*, **9**, 359 (1923).
Квантовый интеграл и дифракция на кристалле.
267. Compton A. H., *Phys. Rev.*, **35**, 925 (1930).
Определение распределения электронов из измерений рассеяния рентгеновских лучей.
268. Condon E. U., *Phys. Rev.*, **32**, 858 (1928).
Смещения ядер, связанные с электронными переходами в двухатомных молекулах.
269. Condon E. U., Seitz F., *Journ. Opt. Soc. Amer.*, **22**, 393 (1932). (Гл. 5, § 5.)
Лорентцево двойное лучепреломление в идеальной системе.
270. Condon E. U., Altar W., Eyring H., *Journ. Chem. Phys.*, **5**, 753 (1937). (Гл. 5, § 5.)
Вращение плоскости поляризации по одноэлектронной теории.
271. Condon E. U., *Rev. Mod. Phys.*, **9**, 432 (1937).
Теории вращения плоскости поляризации.
272. Condon E. U., *Phys. Rev.*, **54**, 1089 (1938).
Внешний фотоэффект в полупроводниках.
273. Coster D., Kroll K. S., Pripps J. A., *Zs. Phys.*, **63**, 345 (1930).
Различие в интенсивностях отражений рентгеновских лучей от обеих (111)-плоскостей цинковой обманки.
274. Coster D., Kroll K. S., *Zs. Phys.*, **75**, 340 (1932). (Гл. 6, § 2.)
Об атомном факторе для рентгеновских лучей в области аномальной дисперсии.
275. Coster D., Kroll K. S., *Proc. Roy. Soc.*, **A139**, 459 (1933). (Гл. 6, § 2.)
Фактор атомного рассеяния для рентгеновских лучей в области аномальной дисперсии.
276. Coster D., Hof S., Rathenau G., Simons C. F. E., *Physica*, **5**, 643 (1938). (Гл. 3, § 11.)
Поглощение в золоте и серебре в ультрафиолетовом диапазоне.
277. Coster D., Van Zanten P. G., *Physica*, **6**, 17 (1939).
Влияние термического возбуждения на интенсивность отражения катодных лучей от кристаллов.
278. Darwin C. G., *Phil. Mag.*, **27**, 315, 675 (1914). (Гл. 6, § 3.)
Теория отражения рентгеновских лучей, I, II.
279. Darwin C. G., *Phil. Mag.*, **43**, 800 (1922).
Об отражении рентгеновских лучей от неидеальных кристаллов
280. Darwin C. G., *Nature*, **110**, 841 (1922); *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S.*, **9**, 25 (1923). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория оптической дисперсии.
281. Darwin C. G., *Nature*, **111**, 771 (1923)
Волновая теория и квантовая теория
282. Darwin C. G., *Proc. Cambr. Phil. Soc.*, **27**, 86 (1931).
Диамагнетизм свободного электрона.

283. Darwin C. G., Nature, 133, 62 (1934). (Гл. 5, § 3.)
Преломление в ионизированной среде.
284. Darwin C. G., Proc. Roy. Soc., A146, 17 (1934). (Гл. 5, § 1 и 3.)
Коэффициент преломления ионизированной среды.
285. Davisson C. J., Germer L. J., Nature, 119, 558 (1927). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние электронов монокристаллом никеля.
286. Davisson C. J., Germer L. J., Phys. Rev., 30, 705 (1927). (Гл. 3, § 11.)
Дифракция электронов в кристалле никеля.
287. Davisson C. J., Germer L. J., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 14, 317, 619 (1928). (Гл. 3, § 11.)
Отражение электронов от кристалла никеля.
288. Davisson C. J., Germer L. J., Phys. Rev., 33, 292 (1929). (Гл. 3, § 11.)
«Аномальная дисперсия» электронных волн в никеле.
289. Debye P., App. Phys., 39, 789 (1912). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 6.)
К теории теплоемкости.
290. Debye P., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 15, 678 (1913). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 6.)
О влиянии теплового движения на интерференцию рентгеновских лучей.
291. Debye P., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 15, 738 (1913).
О распределении интенсивности на рентгеновских интерференционных картинах.
292. Debye P., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 15, 857 (1913). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 1.)
Спектральное разложение рентгеновского излучения, вызванное отражением и тепловым движением.
293. Debye P., App. Phys., 43, 49 (1914). (Гл. 1, § 5; гл. 7, § 1.)
Интерференция рентгеновских лучей и тепловое движение.
294. Debye P., App. Phys., 46, 809 (1915).
Рассеяние рентгеновских лучей.
295. Debye P., Scherrer P., Phys. Zs., 19, 474 (1918).
Строение атома.
296. Debye P., Phys. Zs., 24, 161 (1923).
Рассеяние рентгеновских лучей и квантовая теория.
297. Debye P., Sears F. W., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 18, 409 (1932). (Гл. 1, § 5.)
О рассеянии света ультразвуковыми волнами.
298. Debye P., Sächs. Akad. Wiss. Leipzig Math.-Phys. Kl., 84, 125 (1932). (Гл. 8, § 1.)
Звуковые волны как оптическая решетка.
299. Debye P., Phys. Zs., 33, 849 (1932). (Гл. 1, § 5; гл. 8, § 1.)
Рассеяние света звуковыми волнами.
300. De Haas W. J., van Alphen P. M., Leiden Commun., 212a (1930); 220d (1932). (Гл. 3, § 9.)
Зависимость восприимчивости диамагнитных металлов от поля.
301. De Haas W. J. (см. [428, 763]).
302. Dirac P. A. M., Proc. Roy. Soc., A111, 405 (1926) (Гл. 1, § 5.)
Релятивистская квантовая механика с приложением к комптоновскому рассеянию.
303. Dirac P. A. M., Proc. Roy. Soc., A112, 661 (1926). (Гл. 1, § 4.)
К теории квантовой механики.
304. Dirac P. A. M., Proc. Roy. Soc., A114, 710 (1927). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория дисперсии.

305. Dirac P. A. M., Proc. Roy. Soc., A114, 243 (1927). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория испускания и поглощения света.
306. Dirac P. A. M., Proc. Camb. Phil. Soc., 23, 500 (1927). (Гл. 1, § 5.)
Эффект Комптона в волновой механике.
307. Dirac P. A. M., Proc. Camb. Phil. Soc., 26, 376 (1930). (Гл. 10, § 1 и 2; гл. 11, § 7.)
Обменные эффекты модели атома по Томасу.
308. Дорфман Я. Г., Жукова П. Н., ЖЭТФ, 9, 51 (1939). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Влияние инородных металлических атомов на эффект Холла в серебре.
309. Dru de P., Ann. Phys., 1, 566 (1900) (Гл. 1, § 1.)
К электронной теории металлов.
310. Dru de P., Phys. Zs., 1, 161 (1900).
К ионной теории металлов.
311. Dru de P., Ann. Phys., 3, 369 (1900). (Гл. 1, § 1; гл. 2, § 4.)
К электронной теории металлов. II. Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты.
312. Dru de P., Ann. Phys., 14, 936 (1901). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства и электронная теория.
313. Duane W., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 9, 158 (1923).
Передача количества движения от квантов излучения к веществу.
314. Duane W., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 11, 489 (1925).
Расчет интенсивности рассеяния рентгеновских лучей в различных точках кристалла.
315. Du Bridge L. A., Rev. Sci. Instr., 9, 1 (1938).
Физика твердого тела.
316. Du Bridge L. A., Amer. Phys. Teacher, 7, 357 (1939).
Некоторые аспекты электронной теории твердого тела.
317. Дуускаертс G., Physica, 6, 817, (1939). (Гл. 1, § 4.)
Удельная теплоемкость кобальта от 2 до 18° К.
318. Дуускаертс G., Compt. Rend., 208, 979 (1939). (Гл. 1, § 4.)
Удельная теплоемкость железа между 1,5 и 20° К.
319. Ескарт С., Zs. Phys., 37, 48 (1928). (Гл. 1, § 4.)
Об электронной теории металлов на основе статистики Ферми, в частности об эффекте Вольта.
320. Ehrenfest P., Zs. Phys., 34, 362 (1925). (Гл. 8, § 5.)
Флуктуации энергии в поле излучения или в кристаллической решетке при суперпозиции квантованных собственных колебаний.
321. Ehrenfest P., Uhlenbeck G. E., Zs. Phys., 41, 24 (1927).
Волномеханическая интерпретация статистики Больцмана в свете новейшей статистики.
322. Ehrenfest P. (см. [330]).
323. Einstein A., Ann. Phys., 22, 180, 800 (1907). (Гл. 7, § 1; гл. 8, § 5.)
Теория излучения Планка и теория теплоемкости.
324. Einstein A., Ann. Phys., 33, 1275 (1910).
Теория опалесценции однородных жидкостей и жидких смесей вблизи критической точки.
325. Einstein A., Ann. Phys., 34, 170, 590 (1911). (Гл. 8, § 5.)
Связь между упругими свойствами и теплоемкостью одноатомных твердых тел.
326. Einstein A., Sitzber. Preuss. Akad. Wiss., 261 (1924); 3 (1925).
Квантовая теория одноатомного идеального газа. I, II.
327. Eisenschitz R., London F., Zs. Phys., 60, 491 (1930). (Приложение 5, § 2 и 7.)
О соотношении вандерваальсовых сил и сил гомеоплярной связи.

328. Elsassser W., Naturwiss., 13, 711 (1925).
Замечания к квантовой механике свободных электронов.
329. Eimersleben O., Phys. Zs., 24, 73, 97 (1923). (Гл. 9, § 3; гл. 10, § 4.)
 ζ -Функция и электростатический потенциал решетки.
330. Epstein P. S., Ehrenfest P., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 10, 133 (1924).
Квантовая теория дифракции Фраунгофера.
331. Epstein P. S., Phys. Rev., 70, 915 (1946). (Гл. 8, § 5; гл. 10, § 4.)
Об упругих свойствах решеток.
332. Evjeп H. M., Phys. Rev., 34, 1385 (1929). (Гл. 10, § 4.)
Изменения энергии при изменении кристаллографической группы.
333. Evjeп H. M., Phys. Rev., 39, 675 (1932). (Гл. 9, § 3; гл. 10, § 4.)
Устойчивость гетерополярных кристаллов.
334. Evjeп H. M., Phys. Rev., 44, 491 (1933). (Гл. 10, § 4.)
Новый анализ данных Слэтера по сжимаемости.
335. Evjeп H. M., Phys. Rev., 44, 501 (1933). (Гл. 10, § 4.)
К теории гетерополярных кристаллов.
336. Ewald P. P., Phys. Zs., 14, 465 (1913).
К теории интерференции рентгеновских лучей в кристаллах.
337. Ewald P. P., Phys. Zs., 14, 1038 (1913).
Замечания к работе М. Лауэ. Рентгеновские снимки трехмерно периодических идеальных кристаллов.
338. Ewald P. P., App. Phys., 49, 1, 117 (1916); 54, 519, 557 (1918). (Гл. 4, § 2; гл. 6, § 1.)
К обоснованию кристаллооптики. I. Теория дисперсии. II. Теория отражения и преломления. III. Кристаллооптика рентгеновских лучей.
339. Ewald P. P., Zs. Phys., 2, 332 (1920).
К закону отражения рентгеновских лучей.
340. Ewald P. P., Phys. Zs., 21, 617 (1920).
Отклонения от брэгговского закона отражения рентгеновских лучей.
341. Ewald P. P., App. Phys., 64, 253 (1921). (Гл. 9, § 3; гл. 10, § 4.)
Расчет оптических и электростатических потенциалов решетки.
342. Ewald P. P., Zs. Phys., 30, 1 (1924).
О коэффициенте преломления рентгеновских лучей и отклонениях от брэгговского закона отражения.
343. Ewald P. P., Phys. Zs., 26, 29 (1925).
Интенсивность рентгеновского отражения и структурный фактор.
344. Ewald P. P., Heгтапп С., Zs. Krist., 65, 251 (1927).
Справедлива ли теорема Фриделя о симметрии рентгеновской интерференции?
345. Fajans K., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 21, 539 (1919). (Гл. 10, § 4.)
Термохимическая проверка борновской теории кристаллической решетки.
346. Fajans K., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 21, 714 (1919). (Гл. 10, § 4.)
Электронное сродство атомов галогенов и энергия ионизации галогидов водорода.
347. Fajans K., Grimm H., Zs. Phys., 2, 299 (1920). (Гл. 10, § 4.)
О молекулярных объемах щелочных галогидов.
348. Fajans K., Herzfeld K. H., Zs. Phys., 2, 309 (1920). (Гл. 9, § 1; гл. 10, § 4.)
Размеры ионов и энергия решетки щелочных галогидов.
349. Fajans K., von Beckeratz K., Zs. Phys. Chem., 97, 478 (1921). (Гл. 10, § 4.)
Поверхностные силы гетерополярных кристаллических решеток; адсорбция изотопов свинца на коллоидальных галоидах серебра.

350. Fajans K., Zs. Phys. Chem., **99**, 395 (1921).
О взаимодействии между удаленными атомами в алмазе и в алифатических молекулах.
351. Fajans K., Naturwiss., **11**, 165 (1923). (Гл. 10, § 4.)
Структура и деформация электронных оболочек и их влияние на химические и оптические свойства неорганических соединений:
352. Fajans K., Zs. Krist., **61**, 18 (1925). (Гл. 10, § 4.)
Свойства солеподобных соединений и строение атомов.
353. Fajans K., Zs. Krist., **66**, 321 (1928). (Гл. 10, § 4.)
Свойства солеподобных соединений и строение атомов. II. Влияние деформаций электронных оболочек.
354. Fajans K., Journ. Chem. Phys., **9**, 281 (1941). (Гл. 10, § 4.)
Поляризация ионов и постоянные решетки.
355. Fajans K., Phys. Rev., **61**, 543 (1942). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение, сжимаемость и электронная поляризуемость ионных кристаллов.
356. Fajans K., Bauer N., Journ. Chem. Phys., **10**, 410 (1942).
Электронная структура и устойчивость галогенов водорода и комплексных ионов XO_4 .
357. Fan H. Y., Phys. Rev., **62**, 388 (1942). (Приложение 2, § 2.)
Контакты между металлами и между металлом и полупроводником.
358. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **34**, 679 (1929). (Гл. 3, § 11.)
Испускание и дифракция электронов кристаллом меди.
359. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **35**, 1131 (1930).
Некоторые эффекты, связанные с дифракцией электронов.
360. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **36**, 1799 (1930). (Гл. 3, § 11.)
Внутренний потенциал в кристалле меди.
361. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **40**, 684 (1932). (Гл. 3, § 11.)
Дифракция медленных электронов от монокристаллов меди и серебра.
362. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **43**, 900 (1933). (Гл. 3, § 11.)
Тонкая структура дифракции электронных лучей от кристалла золота и от серебряной пленки на кристалле золота.
363. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **44**, 417 (1933). (Гл. 3, § 11.)
По поводу статьи В. Спрулла «Дифракция медленных электронов от монокристалла вольфрама».
364. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **49**, 598 (1936).
Исследование некоторых эффектов, сопровождающих дифракцию медленных электронов.
365. Farnsworth H. E., Phys. Rev., **49**, 605 (1936).
Проникновение медленных электронов при дифракции.
366. Faxen H., Ann. Phys., **54**, 615 (1918). (Гл. 8, § 1.)
Рассеянное излучение, возникающее вследствие теплового движения при интерференции рентгеновских лучей.
367. Faxen H., Zs. Phys., **17**, 266 (1923). (Гл. 8, § 1.)
Рассеянные излучения, возникающие вследствие теплового движения при интерференции рентгеновских лучей.
368. Faxen H., Hoitsmark J., Zs. Phys., **45**, 307 (1927).
К теории прохождения медленных электронов через газы.
369. Фейнберг Е. Л., Phys. Zs. Sowjetunion, **8**, 407 (1935).
Некоторые соотношения между атомными решетками.
370. Фейнберг Е. Л., Phys. Zs. Sowjetunion, **8**, 416 (1935). (Гл. 10, § 1.)
О возможности применения метода Томаса—Ферми к проблеме металлической связи.
371. Fermi E., Nuovo Cimento, **7**, 145 (1924).
Квантованные системы, содержащие идентичные элементы,

372. Fermi E., *Zs. Phys.*, **26**, 54 (1924).
О вероятности квантовых состояний.
373. Fermi E., *Accad. Lincei Atti*, **3**, 145 (1926)
Квантование одноатомного идеального газа.
374. Fermi E., *Zs. Phys.*, **36**, 902 (1926). (Гл. 1, § 4.)
О квантовании идеального одноатомного газа.
375. Fermi E., *Accad. Lincei Atti*, **6**, 602 (1927).
Приложение методов газовой статистики к электронным системам.
376. Fermi E., *Zs. Phys.*, **48**, 73 (1928). (Гл. 10, § 1.)
Статистический метод определения некоторых свойств атома и его применение к теории периодической системы элементов.
377. Fermi E., *Zs. Phys.*, **49**, 550 (1928). (Гл. 10, § 1.)
Статистический расчет поправок Ридберга для s-термов.
378. Finch G. I., Wilman H., *Ergebn. Exakt. Naturwiss.*, **16**, 353 (1937).
Изучение структуры поверхности с помощью дифракции электронов.
379. Fine P. C., *Phys. Rev.*, **56**, 355 (1939). (Гл. 8, § 6.)
Нормальные колебания объемноцентрированной кубической решетки.
380. Фок В., *Zs. Phys.*, **47**, 446 (1928). (Гл. 3, § 3.)
Замечание к квантованию гармонического осциллятора в магнитном поле.
381. Фок В., *Phys. Zs. Sowjetunion*, **1**, 747 (1932). (Гл. 10, § 1.)
О справедливости теоремы вириала в теории Томаса — Ферми.
382. Förster T., *Zs. Phys. Chem.*, **B41**, 287 (1938).
Поглощение света ароматическими углеводородами.
383. Förster T., *Zs. Elektrochem.*, **45**, 548 (1939).
Цвет и строение органических соединений с точки зрения современной физической теории.
384. Förster T., *Zs. Phys. Chem.*, **B47**, 245 (1940).
Квантовомеханические расчеты к теории органических красителей. I.
385. Fowler R. H., *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.*, **87**, 114 (1926). (Гл. 10, § 4.)
О плотном веществе.
386. Fowler R. H., *Proc. Roy. Soc.*, **A140**, 505 (1933).
Элементарная теория электронных полупроводников и некоторые возможные их свойства.
387. Fowler R. H., *Proc. Roy. Soc.*, **A141**, 56 (1933).
Замечания о некоторых электронных свойствах проводников и изоляторов.
388. Fowler R. H., *Phys. Zs. Sowjetunion*, **3**, 507 (1933).
Обзор по теории полупроводников.
389. Fox J. J., Martin A. E., *Journ. Amer. Chem. Soc.*, **59**, 2106 (1938).
Соотношение между силовой константой, межъядерным расстоянием и теплотой разрыва связи.
390. Frank N. H., *Zs. Phys.*, **60**, 682 (1930). (Гл. 3, § 10.)
Замечания к теории изменения сопротивления металлов в магнитном поле.
391. Frank N. H., *Zs. Phys.*, **63**, 596 (1930). (Гл. 2, § 4.)
К теории гальваномагнитных, термомагнитных и термоэлектрических явлений в металлах.
392. Frank N. H., *Naturwiss.*, **34**, 751 (1930). (Гл. 3, § 10.)
К теории изменения сопротивления в сильных магнитных полях.
393. Frank N. H., *Phys. Rev.*, **47**, 282 (1935).
Влияние давления на электропроводность солей щелочных металлов.
394. Frank N. H. (см. [790]).

395. Freed S., Weissman S. I., Journ. Chem. Phys., **8**, 840 (1940). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки кристаллов и соответствующие колебания их растворов. II.
396. Френкель Я. И., Zs. Phys., **49**, 31 (1928).
Элементарная теория магнитных и электрических свойств металлов при абсолютном нуле температуры.
397. Френкель Я. И., Мирулобов Н., Zs. Phys., **49**, 885 (1928). (Гл. 1, § 5.)
К волномеханической теории металлической проводимости.
398. Френкель Я. И., Proc. Intern. Conf. Phys., Como, 1928, Bologna, p. 1.
Новые достижения электронной теории металлов.
399. Френкель Я. И., Phys. Rev., **36**, 1604 (1930).
Об электрическом сопротивлении контактов между твердыми проводниками.
400. Френкель Я. И., Zs. Phys., **59**, 649 (1930). (Гл. 10, § 4.)
О формуле для среднего потенциала решетки.
401. Френкель Я. И., Phys. Rev., **37**, 17, 1276 (1931). (Приложение 2, § 1.)
О преобразовании света в тепло в твердых телах. I, II.
402. Френкель Я. И., Иоффе А. Ф., Phys. Zs. Sowjetunion, **1**, 60 (1932).
Об электрических и фотоэлектрических свойствах контакта между металлом и полупроводником.
403. Френкель Я. И., Phys. Zs. Sowjetunion, **2**, 247 (1932).
Об элементарном выводе некоторых соотношений электронной теории металлов.
404. Френкель Я. И., Иоффе А. Ф., Phys. Rev., **39**, 530 (1932).
Об электрических и фотоэлектрических свойствах контакта между металлом и полупроводником.
405. Френкель Я. И., Phys. Zs. Sowjetunion, **9**, 158 (1936). (Приложение 2, § 1.)
О поглощении света и захвате электронов и положительных дырок в кристаллических диэлектриках.
406. Friedrich W., Knipping P., Laue M., Sitzber. Math.-Phys. Kl. Bayer. Akad. Wiss., 1912, S. 303; Ann. d. Phys., **41**, 971 (1913). (Гл. 6, § 1.)
Явление интерференции рентгеновских лучей.
407. Fröhlich H., Zs. Phys., **75**, 539 (1932). (Гл. 5, § 5.)
Поглощение света и селективный фотоэффект.
408. Fröhlich H., Proc. Roy. Soc., **A158**, 97 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Квантовомеханическая трактовка сил сцепления и коэффициентов теплового расширения щелочных металлов.
409. Fröhlich H., Proc. Roy. Soc., **A160**, 230 (1937).
Теория электрического пробоя ионных кристаллов.
410. Fröhlich H., Physica, **4**, 406 (1937). (Гл. 1, § 4.)
Электронная теплоемкость малых металлических частиц при низких температурах.
411. Fröhlich H., Mott N. F., Proc. Roy. Soc., **A171**, 496 (1939). (Гл. 8, § 3.)
Средняя длина пробега электронов в полярных кристаллах.
412. Fröhlich H., Proc. Roy. Soc., **A172**, 94 (1939).
Теория электрического пробоя ионных кристаллов. II.
413. Fröhlich H., Phys. Rev., **56**, 349 (1939).
Диэлектрический пробой ионных кристаллов.
414. Fröhlich H., Rep. Progr. Phys., **6**, 411 (1939).
Диэлектрический пробой твердых тел.

415. Fröhlich H., Proc. Roy. Soc., **A178**, 493 (1941).
О пробивной напряженности поля в смешанных кристаллах.
416. Fröhlich H., Phys. Rev., **61**, 200 (1942).
Электрический пробой ионных кристаллов.
417. Fröhlich H., Nature, **151**, 339 (1943).
Теория диэлектрического пробоя.
418. Fuchs K., Proc. Roy. Soc., **A151**, 585 (1935). (Гл. 10, § 4)
Квантовомеханическое исследование сил сцепления в металлической меди.
419. Fuchs K., Proc. Roy. Soc., **A153**, 622 (1936). (Гл. 10, § 4)
Квантовомеханический расчет упругих постоянных одновалентных металлов.
420. Fuchs K., Proc. Roy. Soc., **A157**, 444 (1936). (Гл. 10, § 4)
Упругие постоянные и теплоемкость щелочных металлов.
421. Fuchs K., Proc. Camb. Phil. Soc., **34**, 100 (1938).
Проводимость тонких металлических пленок согласно электронной теории металлов.
422. Fuchs K., Proc. Roy. Soc., **A176**, 214 (1940).
Операторное исчисление в электронной теории металлов.
423. Fuchs K., Proc. Roy. Soc., **A180**, 451 (1942). (Гл. 10, § 4)
Кристаллическая теория металлов: расчет упругих постоянных.
424. Fujioka Y., Zs. Phys., **76**, 537 (1932). (Гл. 5, § 5.)
К теории дисперсии в металлическом проводнике.
425. Fürth R., Proc. Roy. Soc., **A180**, 285 (1942). (Гл. 8, § 6.)
К теории конечных деформаций упругих кристаллов.
426. Fürth R., Proc. Roy. Soc., **A183**, 87 (1944). (Гл. 8, § 5.)
Об уравнении состояния твердых тел.
427. Fürth R. (см. [209]).
428. Gerritsen A. N., de Haas W. J., Physica, **7**, 802 (1940). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Измерения эффекта Холла в чистых монокристаллах висмута при низких температурах.
429. Gerritsen A. N. (см. [258]).
430. Glocker R., Schäfer K., Zs. Phys., **73**, 289 (1932). (Гл. 6, § 2.)
Определение атомного фактора в области аномальной дисперсии.
431. Goldstein L., Compt. Rend., **189**, 984 (1929). (Гл. 11, § 7.)
О релятивистском подходе к проблеме многих тел.
432. Goldstein L., Compt. Rend., **190**, 1502 (1930). (Гл. 11, § 7.)
Распределение потенциала и заряда в двухатомной молекуле.
433. Goldstein L., Compt. Rend., **191**, 521 (1930). (Гл. 11, § 7.)
Принцип исключения и внутримолекулярная статистика.
434. Goldstein L., Compt. Rend., **191**, 606 (1930). (Гл. 11, § 7.)
Статистическая оценка кулоновской энергии взаимодействия в молекуле.
435. Goldstein L., Compt. Rend., **191**, 766 (1930). (Гл. 11, § 7.)
О распределении электронов в атоме.
436. Goldstein L., Journ. Phys. Rad., **1**, 271 (1930). (Гл. 11, § 7.)
Релятивистский подход к атому с многими электронами.
437. Gombas P., Zs. Phys., **94**, 473 (1935). (Гл. 10, § 4.)
О металлической связи.
438. Gombas P., Zs. Phys., **95**, 687 (1935). (Гл. 3, § 11.)
К теории щелочных металлов
439. Gombas P., Zs. Phys., **99**, 729 (1936); II, **100**, 599 (1936); III, **104**, 81 (1937); IV, **104**, 592 (1937).
К теории металлической связи.

440. Gombas P., Peter G., Zs. Phys., **107**, 656 (1937). (Гл. 3, § 11.)
Расчет важнейших постоянных металлических стронция и бария.
441. Gombas P., Zs. Phys., **108**, 509 (1938). (Гл. 3, § 11.)
О распределении электронов в щелочных металлах.
442. Gombas P., Zs. Phys., **121**, 523 (1943). (Гл. 10, § 1.)
Обобщение статистической теории атома.
443. Gombas P. (см. [697]).
444. Gordon W., Zs. Phys., **40**, 117 (1927). (Гл. 1, § 5.)
Эффект Комптона по теории Шредингера.
445. Grüneisen E., Verhandl. Deut. Phys. Ges., **13**, 426 (1911). (Гл. 7, § 1.)
Отношение коэффициента теплового расширения к теплоемкости твердых элементов.
446. Gurney R. W., Mott N. F., Proc. Phys. Soc., **49**, 32 (1937).
Захваченные электроны в полярных кристаллах.
447. Gurney R. W., Mott N. F., Trans. Faraday Soc., **34**, 506 (1938).
Проводимость полярных кристаллов. IV. О центрах окраски в щелочногалогидных кристаллах.
448. Gurney R. W., Mott N. F., Proc. Roy. Soc., **A164**, 151 (1938).
Теория фотолитиза бромистого серебра и скрытого фотографического изображения.
449. Hagen E., Rubens H., Ann. Phys., **11**, 873 (1903). (Гл. 5, § 1.)
О связи коэффициента отражения и эмиссионной способности металлов к их электропроводности.
450. Hall E. H., Amer. Journ. Math., **2**, 287 (1879). (Гл. 2, § 4.)
О новом действии магнита на электрические токи.
451. Hall E. H., A Dual Theory of Conduction in Metals, Cambridge, Mass., 1938. (Гл. 2, § 4.)
Дуальная теория электропроводности металлов.
452. Halpern O., Zs. Phys., **30**, 153 (1924); **38**, 149 (1926).
К теории рассеяния рентгеновских лучей.
453. Halpern O., Zs. Phys., **67**, 320 (1931).
К поляризации электронных волн при отражении.
454. Halpern O., Zs. Phys., **67**, 523 (1931).
Об одном классическом эффекте при рассеянии излучения.
455. Halpern O., Johnson M. H., Phys. Rev., **55**, 898 (1939).
О магнитном рассеянии нейтронов.
456. Harding J. M., Phil. Mag., **23**, 271 (1937).
Динамическая теория дифракции электронов и ее приложение к некоторым задачам физики поверхности.
457. Hartree D. R., Phil. Mag., **46**, 1091 (1923). (Гл. 6, § 2.)
Атомная структура и отражение рентгеновских лучей кристаллами.
458. Hartree D. R., Phil. Mag., **50**, 289 (1925). (Гл. 6, § 2.)
Атомный структурный фактор и интенсивность отражения рентгеновских лучей кристаллами.
459. Hartree D. R., Proc. Camb. Phil. Soc., **25**, 97 (1929). (Гл. 5, § 3.)
Проникновение электромагнитных волн в слоистую среду.
460. Hartree D. R., Proc. Camb. Phil. Soc., **27**, 143 (1932). (Гл. 5, § 3.)
Проникновение электромагнитных волн в преломляющую среду в магнитном поле.
461. Hartree D. R., Nature, **132**, 929 (1933). (Гл. 5, § 3.)
Дисперсионная формула для ионизированной среды.
462. Hartree D. R. (см. [525]).
463. Hassé H., Proc. Camb. Phil. Soc., **27**, 66 (1931). (Приложение 5, § 4.)
Расчет вандерваальсовых сил для водорода и гелия при больших межатомных расстояниях.

464. Havighurst R. J., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 11, 502 (1925).
(Гл. 6, § 2.)
Распределение интенсивности дифракции в хлористом натрии.
465. Havighurst R. J., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 11, 507 (1925).
(Гл. 6, § 2.)
Распределение интенсивности дифракции в некоторых кристаллах.
466. Havighurst R. J., Phys. Rev., 29, 1 (1927). (Гл. 6, § 2.)
Распределение электронов в атомах кристаллов.
467. Heisenberg W., Phys. Zs., 32, 737 (1931).
О некогерентном рассеянии рентгеновских лучей.
468. Гельман Г., Zs. Phys., 82, 192 (1933). (Гл. 10, § 4.)
О квантовой механике химической валентности.
469. Гельман Г., Zs. Phys., 85, 180 (1933). (Гл. 10, § 1 и 4.)
О роли кинетической энергии электронов в межатомных силах.
470. Гельман Г., Acta Physicochim. URSS, 1, 334 (1934). (Гл. 10, § 4.)
О природе химических сил.
471. Гельман Г., Acta Physicochim. URSS, 1, 913 (1935); 4, 225 (1936).
(Гл. 10, § 4.)
Комбинированный приближенный метод для расчета энергии много-
электронной системы.
472. Гельман Г., Сыркин Я. К., Acta Physicochim. URSS, 2, 433 (1935).
(Гл. 10, § 4.)
К вопросу об аномально малых стерических факторах в химической
кинетике.
473. Гельман Г., Zs. Phys., 94, 361 (1935). (Гл. 10, § 1.)
Расчет оптических термов с помощью статистического потенциала
Ферми.
474. Гельман Г., Zs. Phys., 96, 247 (1935).
Замечание о поляризации электронных волн при рассеянии.
475. Гельман Г., Acta Physicochim. URSS, 2, 273 (1935). (Приложение 5,
§ 7.)
О квантовомеханическом расчете поляризуемости и дисперсионных
сил.
476. Гельман Г., Phys. Zs. Sowjetunion, 9, 522 (1936). (Гл. 10, § 4.)
Замечание к работе Е. Л. Хилла «Теорема вириала и теория плавления».
477. Гельман Г., Касаточкин В., Journ. Chem. Phys., 4, 324 (1936).
(Гл. 10, § 4.)
Металлическая связь в рамках комбинированного приближенного
метода.
478. Гельман Г., Касаточкин В., Acta Physicochim. URSS, 5, 23
(1936). (Гл. 10, § 4.)
Металлическая связь в рамках комбинированного приближенного
метода.
479. Гельман Г., Trans. Faraday Soc., 33, 40 (1937).
Замечания к книге Лондона «Общая теория молекулярных сил».
480. Herring C., Phys. Rev., 55, 598 (1939). (Гл. 10, § 4.)
Сжимаемость лития.
481. Herzfeld K. F., Phys. Rev., 29, 701 (1927).
Об атомных свойствах, обеспечивающих металлический характер
элемента.
482. Herzfeld K. F., Phys. Rev., 35, 248 (1930).
Поверхностное нагревание при электризации.
483. Herzfeld K. F., Mayer M. G., Phys. Rev., 48, 995 (1934).
К теории плавления.
484. Herzfeld K. F. (см. [348, 643]).

485. Hettich A, Schleide A, Zs. Phys., 50, 249 (1928).
О методике определения кристаллических классов.
486. Hill E. L., Phys. Zs. Sowjetunion, 8, 401 (1935). (Гл. 10, § 4.)
Теорема вириала и теория плавления.
487. Hilsch R, Pohl R. W., Zs. Phys., 59, 812 (1930). (Гл. 3, § 11;
гл. 8, § 4.)
Некоторые частоты дисперсии щелочногаллоидных кристаллов в шумановской области.
488. Hirschfelder J. O., Journ. Chem. Phys., 3, 555 (1935).
Поляризуемость и связанные с ней свойства молекулярного водорода и двухатомного иона водорода.
489. Holtsmark J., Zs. Phys., 48, 231 (1928).
К теории рассеяния медленных электронов.
490. Holtsmark J., Zs. Phys., 52, 485 (1928).
К теории рассеяния электронов и возбуждения электронным ударом.
491. Holtsmark J., Zs. Phys., 54, 761 (1929).
К теории уширения спектральных линий за счет взаимодействия.
492. Holtsmark J., Zs. Phys., 55, 437 (1929).
Эффект Рамзауэра в аргоне.
493. Holtsmark J., Zs. Phys., 66, 49 (1930).
Поперечное сечение криптона для медленных электронов.
494. Holtsmark J. (см. [368]).
495. Hönl H., Zs. Phys., 84, 1 (1933). (Гл. 6, § 6.)
К теории дисперсии рентгеновских лучей.
496. Hönl H., App. Phys., 18, 625 (1933). (Гл. 6, § 6.)
Атомный фактор для рентгеновских лучей как проблема теории дисперсии.
497. Houston W. V., Zs. Phys., 47, 33 (1928). (Гл. 1, § 4.)
Электронная эмиссия холодных металлов.
498. Houston W. V., Zs. Phys., 48, 449 (1928). (Гл. 1, § 4.)
Электропроводность на основе волновой механики.
499. Houston W. V., Phys. Rev., 33, 361 (1929). (Гл. 1, § 4.)
Температурная зависимость электронной эмиссии в сильных полях.
500. Houston W. V., Phys. Rev., 34, 279 (1929). (Гл. 1, § 4 и 5.)
Температурная зависимость электропроводности.
501. Houston W. V., Phys. Rev., 38, 1797 (1931).
Структура линий мягких рентгеновских лучей.
502. Houston W. V., Phys. Rev., 52, 1047 (1937).
Поверхностный фотоэффект.
503. Houston W. V., Phys. Rev., 55, 1255 (1939).
Сохранение количества движения при электропроводности
504. Houston W. V., Phys. Rev., 57, 184 (1940).
Ускорение электронов в кристаллической решетке.
505. Houston R. A., Phil. Mag., 2, 512 (1926).
К теории поглощения рентгеновских лучей.
506. Huggins M. L., Journ. Chem. Phys., 5, 143 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Энергии решетки, равновесные расстояния, сжимаемости и характеристические частоты щелочногаллоидных кристаллов.
507. Hund F., Zs. Phys., 34, 833 (1925). (Гл. 10, § 4.)
Попытка установить тип решетки, исходя из представления об изотропных поляризуемых ионах.
508. Hund F., Zs. Phys., 94, 11 (1935). (Гл. 10, § 4.)
Сравнение электростатических энергий некоторых ионных решеток.
509. Hund F., Zs. Techn. Phys., 18, 331 (1935); Phys. Zs., 36, 725 (1935).
Теория движения электронов в неметаллических кристаллических решетках.

510. Hund F., *Ergebn. Exakt. Naturw.*, **15**, 189 (1936). (Гл. 10, § 4.)
Вещество при очень высоких давлениях и температурах.
511. Huntington H. B., *Phys. Rev.*, **57**, 60 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Вклады в модули сдвига гексагональных кристаллов.
512. Huntington H. B. (см [868]).
513. Hyllegaas E., *Zs. Phys.*, **36**, 859 (1926). (Гл. 3, § 11.)
Распределение атомов в тетрагональных кристаллах одновалентных галогенидов ртути Hg_2Cl_2 , Hg_2Br_2 , Hg_2I_2 . Расчет двойного лучепреломления в Hg_2Cl_2 .
514. Hyllegaas E., *Zs. Krist.*, **65**, 469 (1927). (Гл. 3, § 11.)
Определение расположения атомов кислорода в рутиле и в анатасе с помощью двойного лучепреломления.
515. Hyllegaas E., *Zs. Phys.*, **44**, 871 (1927). (Гл. 3, § 11.)
Равновесие атомов, двойное лучепреломление и оптическая вращательная способность β -кварца.
516. Hyllegaas E., *Zs. Phys.*, **63**, 771 (1930). (Гл. 10, § 4.)
Волномеханический расчет энергии решетки и постоянные решетки гидрида лития.
517. Юпа М., Jr., *Phys. Rev.*, **60**, 822 (1941). (Гл. 8, § 5.)
О колебательном спектре кристалла KCl.
518. Jaffé G., *Journ. Chem. Phys.*, **8**, 879 (1940).
Локальные поля в поляризованных диэлектриках.
519. Jahn H. A., *Zs. Krist.*, **A98**, 191 (1937). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные анизотропных твердых тел; рассмотрение с помощью теории групп.
520. Jahn H. A., *Proc. Roy. Soc.*, **A179**, 320 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Диффузное рассеяние рентгеновских лучей кристаллами. Теория Факсена — Уоллера и поверхности постоянной амплитуды для кубических кристаллов.
521. Jahn H. A., *Proc. Roy. Soc.*, **A180**, 476 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Диффузное рассеяние рентгеновских лучей кристаллами. II. Детальный расчет поверхностей постоянной амплитуды для (002), (112), (222) и (110) отражений от монокристаллов натрия.
522. Jahn H. A., Lonsdale K., *Phys. Rev.*, **61**, 375 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Диффузное отражение рентгеновских лучей анизотропными и изотропными твердыми телами.
523. James H. M., Johnson V. A., *Phys. Rev.*, **56**, 119 (1939).
Распределение электронов в кристаллах ZnO.
524. James R. W., Firth E. M., *Proc. Roy. Soc.*, **A117**, 62 (1927). (Гл. 6, § 2.)
Тепловое движение атомов в кристалле каменной соли.
525. James R. W., Waller I., Hartree D. R., *Proc. Roy. Soc.*, **A118**, 334 (1928). (Гл. 6, § 2.)
Проверка существования нулевой энергии решетки каменной соли методом дифракции рентгеновских лучей.
526. James R. W., Brindley G. W., *Phil. Mag.*, **12**, 81 (1931); *Zs. Krist.*, **79**, 470 (1931). (Гл. 6, § 2.)
Численные расчеты атомных факторов.
527. James R. W. (см. [231, 843]).
528. Jepsen H., *Zs. Phys.*, **77**, 722 (1932). (Гл. 10, § 1.)
Распределение заряда в ионах и постоянная решетки бромистого рубидия.
529. Jepsen H., *Zs. Phys.*, **80**, 448 (1933).
О некоторых интегралах, существенных для теории уширения спектральных линий, связанного с давлением.

530. Jensen H., Zs. Phys., **81**, 611 (1933). (Гл. 10, § 1.)
О справедливости теоремы вириала в теории Томаса — Ферми.
531. Jensen H., Zs. Phys., **82**, 794 (1933). (Гл. 10, § 1.)
К релятивистской трактовке атома Ферми.
532. Jensen H., Zs. Phys., **89**, 713 (1932); **93**, 232 (1934—1935). (Гл. 10, § 1 и 2.)
Об обмене в атоме Томаса — Ферми.
533. Jensen H., Zs. Phys., **101**, 141 (1936). (Гл. 10, § 1.)
О существовании отрицательных ионов в рамках статистической модели.
534. Jensen H., Zs. Phys., **101**, 164 (1936). (Гл. 10, § 1 и 4.)
Квантотеоретический расчет решетки щелочных галоидов.
535. Jensen H., Zs. Phys., **106**, 620 (1937). (Гл. 11, § 7.)
Собственные колебания ферми-газа и применение блоховской формулы торможения для быстрых частиц.
536. Jensen H., Meyer-Gossler G., Rohde H., Zs. Phys., **110**, 277 (1938). (Гл. 10, § 1 и 4.)
О физическом смысле кристаллографических ионных радиусов.
537. Jensen H., Zs. Phys., **111**, 373 (1938). (Гл. 10, § 1 и 4.)
Диаграмма плотность — давление для элементов при высоких давлениях и абсолютном нуле температуры.
538. Johnson V. A., Zs. Krist., **96**, 493 (1937).
Математическое выражение для распределения заряда в пространственной решетке.
539. Johnson V. A., Phys. Rev., **57**, 613 (1940).
Влияние валентных электронов и искажения электронного облака на интенсивность рассеяния электронов и рентгеновских лучей.
540. Johnson V. A (см. [523]).
541. Jones H., Proc. Roy. Soc., **A127**, 689 (1930). (Гл. 10, § 4.)
Энергия кристаллических решеток.
542. Jones H., Zener C., Proc. Roy. Soc., **A144**, 101 (1934). (Приложение I, § 1.)
Общее доказательство некоторых основных соотношений теории металлической проводимости.
543. Jones H., Proc. Roy. Soc., **A144**, 225 (1934). (Гл. 3, § 11; гл. 10, § 4.)
Теория сплавов в γ -фазе.
544. Jones H., Zener C., Proc. Roy. Soc., **A145**, 268 (1934). (Гл. 3, § 10.)
Теория изменения сопротивления в магнитном поле.
545. Jones H., Proc. Roy. Soc., **A147**, 396 (1934). (Гл. 3, § 11.)
Приложение теории Блоха к изучению сплавов и свойств висмута.
546. Jones H., Helv. Phys. Acta, **7** (Suppl. 2), 84 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Применение электронной теории металлов к изучению сплавов.
547. Jones H., Proc. Roy. Soc., **A155**, 653 (1936). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Теория гальваномагнитных эффектов в висмуте.
548. Jones H., Mott N. F., Proc. Roy. Soc., **A162**, 49 (1937).
Электронная теплоемкость и рентгеновское поглощение металлов и некоторые другие свойства, относящиеся к электронным зонам.
549. Jones H., Proc. Phys. Soc., **49**, 243 (1937).
Границы фаз в бинарных сплавах. I Равновесие между жидкой и твердой фазами.
550. Jordan P., Zs. Phys., **37**, 376 (1926).
Замечание о связи между квантовой теорией интерференции Дуэна и волнами де Бройля.
551. Jordan P., Zs. Phys., **44**, 473 (1927).
К квантовой механике вырожденного газа.

552. Каллманн Н., Марк Н., *Naturwiss.*, **14**, 648 (1926).
Об аномальной дисперсии в области рентгеновских лучей.
553. Каллманн Н., Марк Н., *Ann. d. Phys.*, **82**, 585 (1927).
О дисперсии и рассеянии рентгеновских лучей.
554. Капица П., *Proc. Roy. Soc.*, **A123**, 292, 342 (1929). (Гл. 3, § 10.)
Изменение электрического сопротивления в сильных магнитных полях. I. Экспериментальные результаты. II. Анализ и интерпретация экспериментальных результатов.
555. Кeesom W. H., Kuggelmeуer B., *Physika*, **6**, 364 (1939). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость железа в интервале от 1,1 до 20,4° К.
556. Кeesom W. H., Kuggelmeуer B., *Physika*, **7**, 1003 (1940). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкости сплавов никеля с медью и железом в интервале от 1,2 до 20° К.
557. Kelleгтапп E. W., *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **A238**, 513 (1940). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Теория колебаний решетки.
558. Kelleгтапп E. W., *Proc. Roy. Soc.*, **A178**, 17 (1941). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
О теплоемкости кристаллов хлористого натрия.
559. Kikuchi S., *Proc. Imp. Acad. (Tokyo)*, **4**, 271, 275, 354, 471 (1928).
Дифракция катодных лучей от слюды.
560. Kikuchi S., *Zs. Phys.*, **68**, 803 (1931). (Гл. 1, § 5.)
К теории эффекта Комптона.
561. Kikuchi S. (см. [701]).
562. Kirkwood J. G., *Phys. Zs.*, **33**, 57 (1932). (Приложение 5, § 7.)
Поляризуемости, восприимчивости и вандерваальсовы силы атомов с несколькими электронами.
563. Kirkwood J. G. (см. [775, 1072]).
564. Kohler M., *Ann. Phys.*, **18**, 265 (1933).
Динамическое отражение рентгеновских лучей от идеальных, в частности, поглощающих кристаллов.
565. Конобеевский С. Т., *Ann. Phys.*, **26**, 97 (1936).
Применение квантовой теории металлов к исследованию фазовых равновесий в сплавах.
566. Kramerс H. A., *Phil. Mag.*, **46**, 836 (1923).
К теории рентгеновского поглощения и сплошного рентгеновского спектра.
567. Kramerс H. A., *Phys. Zs.*, **30**, 522 (1929).
Дисперсия и поглощение рентгеновских лучей.
568. Kramerс H. A. (см. [579, 712]).
569. Krishnan K. S., Bhatia A. B., *Proc. Natl. Acad. Sci. India*, **A14**, 153 (1944). (Гл. 3, § 11.)
Изучение сопротивления бинарных сплавов. I. Упорядоченно-неупорядоченные сплавы типа CuZn в условиях равновесия.
570. Krishnan K. S., Bhatia A. B., *Nature*, **156**, 503 (1945).
Электрическое сопротивление жидких металлов.
571. Kroll W., *Zs. Phys.*, **66**, 69 (1930). (Гл. 3, § 8; гл. 5, § 5.)
О квантовой механике явлений дисперсии и магнитного вращения в электронной теории Дирака.
572. Kroll W., *Zs. Phys.*, **77**, 322 (1932).
К теории термоэлектрических эффектов.
573. Kroll W., *Zs. Phys.*, **80**, 50 (1932).
К теории термоэлектрических эффектов при низких температурах.

574. Kroll W., Zs. Phys., 85, 398 (1933).
К теории зависимости электропроводности металлов от давления.
575. Kropig R., Journ. Opt. Soc. Amer., 12, 547 (1926). (Гл. 5, § 5.)
Теория рассеяния рентгеновских лучей.
576. Kropig R., Zs. Phys., 45, 458 (1927).
К теории эффекта Керра в газах. I. Линейный эффект.
577. Kropig R., Zs. Phys., 45, 508 (1927).
К теории эффекта Фарадея в газах. I. Линейный эффект.
578. Kropig R., Zs. Phys., 47, 702 (1928).
К теории эффектов Керра и Фарадея в газах. II. Квадратичные эффекты.
579. Kropig R., Kramers H. A., Zs. Phys., 48, 174 (1928). (Гл. 5, § 5.)
К теории поглощения и рассеяния в рентгеновских спектрах.
580. Kropig R., Proc. Roy. Soc., A124, 409 (1929). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория дисперсии в металлических проводниках.
581. Kropig R., Zs. Phys., 70, 317 (1931); 75, 191, 468 (1932).
К теории тонкой структуры спектров поглощения рентгеновских лучей, I, II, III.
582. Kropig R., Proc. Roy. Soc., A133, 255 (1931). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория дисперсии в металлических проводниках. II.
583. Kropig R., Groenewold H. J., Koninkl. Akad. Amsterdam Proc., 35, 974 (1932). (Гл. 5, § 5.)
Поправка Лоренца — Лоренца в металлических проводниках.
584. Kropig R., Nature, 132, 601 (1933). (Гл. 5, § 3 и 5.)
Замечательные оптические свойства щелочных металлов.
585. Kropig R., Naturwiss., 22, 11 (1934).
К истолкованию тонкой структуры края оптического поглощения металлов.
586. Kropig R., Groenewold H. J., Physica, 1, 255 (1934). (Гл. 5, § 5.)
О поправке Лоренца — Лоренца в металлических проводниках.
587. Kropig R., Proc. Roy. Soc., A124, 409 (1939). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория дисперсии в металлических проводниках.
588. Kropig R., Koringa J., Physica, 10, 406, 800 (1943). (Гл. 5, § 3.)
К теории торможения быстрых заряженных частиц в металлических проводниках.
589. Kropig R., de Boer J., Koringa J., Physica, 12, 245 (1946). (Гл. 10, § 4.)
О внутреннем строении Земли.
590. Ландау Л. Д., Zs. Phys., 64, 629 (1930). (Гл. 3, § 2 и 8.)
Диамагнетизм металлов.
591. Ландау Л. Д., Phys. Zs. Sowjetunion, 3, 664 (1933).
О движении электронов в кристаллической решетке.
592. Ландау Л. Д., Румер Ю. Б., Phys. Zs. Sowjetunion, 11, 18 (1937) (Гл. 3, § 9.)
О поглощении звука в твердых телах.
593. Lapd e A., Verhandl. Deut. Phys. Ges., 20, 217 (1918). (Гл. 10, § 4.)
Электростатический потенциал в решетке плавикового шпата.
594. Lapd e A., Zs. Phys., 1, 191 (1920). (Гл. 9, § 1; гл. 10, § 4.)
О величине атомов.
595. Lapd e A., Zs. Phys., 2, 83 (1920).
Динамика пространственной атомной структуры. IV.
596. Lapd e A., Zs. Phys., 44, 768 (1927).
О волновой механике континуума и электродинамике.
597. Lapd e A., Zs. Phys., 74, 780 (1932).
К квантовой механике вырожденных газов.
598. Lapd e A. (см. [189—191]).

599. Landshoff R., Zs. Phys., 102, 201 (1936). (Гл. 9, § 6; гл. 10, § 4.)
Квантовомеханический расчет энергии решетки NaCl в зависимости от постоянной решетки.
600. Landshoff R., Phys. Rev., 52, 246 (1937). (Гл. 9, § 6; гл. 10, § 4.)
Квантовомеханический расчет энергии решетки NaCl.
601. Laue M. (см. [821—836]).
602. Laval J., Compt. Rend., 207, 169 (1938). (Гл. 8, § 1.)
О рассеянии рентгеновских лучей кристаллом.
603. Laval J., Bull. Soc. Franc. Minéral., 62, 137 (1939). (Гл. 8, § 1.)
Экспериментальное изучение рассеяния рентгеновских лучей кристаллами.
604. Laval J., Compt. Rend., 208, 1512 (1939). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние рентгеновских лучей кристаллами не в направлении селективного отражения.
605. Laval J., Bull. Soc. Franc. Minéral., 64, 1 (1941). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние рентгеновских лучей кристаллами.
606. Ledertapp W., Nature, 151, 197 (1943). (Гл. 8, § 5.)
Спектральная плотность в динамике решетки.
607. Leppard-Jones J. E., Proc. Roy. Soc., A106, 441 (1924). (Гл. 10, § 4.)
Об определении молекулярных полей. I. Изменения вязкости газа с температурой.
608. Leppard-Jones J. E., Proc. Roy. Soc., A106, 463 (1924). (Гл. 10, § 4.)
Об определении молекулярных полей. II. Из уравнения состояния газа.
609. Leppard-Jones J. E., Proc. Roy. Soc., A106, 709 (1924). (Гл. 10, § 4.)
Об определении молекулярных полей. III. Из измерений на кристаллах и данных по кинетической энергии.
610. Leppard-Jones J. E., Proc. Roy. Soc., A107, 157 (1925). (Гл. 10, § 4.)
Об атомных полях гелия и неона.
611. Leppard-Jones J. E., Ingham A. E., Proc. Roy. Soc., A107, 636 (1925). (Гл. 10, § 4.)
О расчете некоторых постоянных кристаллического потенциала и о кубическом кристалле с наименьшей потенциальной энергией.
612. Leppard-Jones J. E., Taylor P. A., Proc. Roy. Soc., A109, 476 (1925). (Гл. 10, § 4.)
Теоретические расчеты физических свойств некоторых кристаллов.
613. Leppard-Jones J. E., Proc. Roy. Soc., A109, 584 (1925). (Гл. 10, § 4.)
Силы между атомами и ионами.
614. Leppard Jones J. E., Dent B. M., Proc. Roy. Soc., A112, 230 (1926). (Гл. 10, § 4.)
Силы между атомами и ионами.
615. Leppard-Jones J. E., Dent B. M., Proc. Roy. Soc., A113, 673 (1927). (Гл. 10, § 4.)
Некоторые теоретические определения структуры карбоната.
616. Leppard-Jones J. E., Cook W. R., Proc. Roy. Soc., A115, 334 (1927). (Гл. 10, § 4.)
Уравнение состояния смеси газов.
617. Leppard-Jones J. E., Dent B. M., Phil. Mag., 3, 1204 (1927). (Гл. 10, § 4.)
Некоторые теоретические определения параметров кристаллов.

618. Lennard-Jones J. E., Woods H. J., Proc. Roy. Soc., A120, 727 (1928).
Распределение электронов в металле.
619. Lennard-Jones J. E., Dent B. M., Proc. Roy. Soc., A121, 247 (1928). (Гл. 10, § 4.)
Изменения пространственной решетки на границе кристаллов.
620. Lennard-Jones J. E., Proc. Roy. Soc., 40, 320 (1928).
Некоторые последние достижения статистической механики.
621. Lennard-Jones J. E., Zs. Krist., 75, 215 (1930). (Гл. 10, § 4.)
Зависимость постоянной решетки от размера кристалла.
622. Lennard-Jones J. E., Proc. Phys. Soc., 43, 461 (1931). (Гл. 10, § 4.)
Силы сцепления.
623. Lennard-Jones J. E., Trans. Faraday Soc., 30, 58 (1934). (Гл. 3, § 11.)
Дискуссия о графите.
624. Lennard-Jones J. E., Devonshire A. F., Proc. Roy. Soc., A169, 317 (1939). (Гл. 10, § 4.)
Критические и кооперативные явления. III. Теория плавления и строение жидкостей.
625. Lennard-Jones J. E., Devonshire A. F., Proc. Roy. Soc., A170, 464 (1939). (Гл. 10, § 4.)
Критические и кооперативные явления. IV. Теория разупорядочения в твердых телах и жидкостях и процесс плавления.
626. Lennard-Jones J. E., Proc. Phys. Soc., 52, 38 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Некоторые теоретические проблемы физики твердого тела.
627. Lensen M. H., Michels A., Physica, 2, 1091 (1935).
К теории влияния давления на электрическое сопротивление металлов.
628. Lenz W., Zs. Phys., 77, 713 (1932). (Гл. 10, § 1.)
О применимости статистических методов к теории ионной решетки.
629. London F., Zs. Phys. Chem., B11, 222 (1930). (Приложение 5, § 7.)
Свойства и приложения молекулярных сил.
630. London F., Trans. Faraday Soc., 38, 8 (1937). (Приложение 5, § 7.)
Общая теория молекулярных сил.
631. London F. (см. [327]).
632. Lonsdale K., Smith H., Proc. Roy. Soc., A179, 8 (1941). (Гл. 8, § 1.)
Экспериментальное изучение диффузного рентгеновского отражения от монокристаллов.
633. Lonsdale K., Smith H., Proc. Phys. Soc., 53, 529 (1941). (Гл. 8, § 1.)
Вторичный дифракционный эффект на лауэграмме алмаза.
634. Lonsdale K., Smith H., Nature, 148, 628 (1941). (Гл. 8, § 1.)
Рентгеновские диффузные отражения от натрия и лития в связи с упругой анизотропией.
635. Lonsdale K., Smith H., Nature, 149, 21 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Рентгеновское изучение упругих констант металлов.
636. Lonsdale K., Proc. Phys. Soc., 54, 314 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Рентгеновское изучение динамики кристаллов.
637. Lonsdale K., Rep. Progr. Phys., 9, 256 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Экспериментальное изучение рентгеновского рассеяния в связи с динамикой кристаллов.
638. Lonsdale K. (см. [213, 522]).
639. Lorentz H. A., Wied. Ann., 9, 641 (1880). (Гл. 4, § 1.)
О соотношении между скоростью распространения света и плотностью тел.

640. Lorentz H. A., Proc. Amsterdam Acad., 438, 588, 684 (1905). (Гл. 1, § 1.)
Движение электронов в металле.
641. Lorenz L., Wied. Ann., 11, 70 (1880). (Гл. 4, § 1.)
О коэффициенте преломления.
642. Lowery H., Wilkinson H., Smart D. L., Proc. Phys. Soc., 49, 345 (1937). (Гл. 3, § 1.)
Об оптических постоянных сплавов медь — цинк.
643. Lyddane R. H., Herzfeld K. F., Phys. Rev., 54, 846 (1938). (Гл. 8, § 3 и 6; гл. 9, § 5.)
Колебания решеток в ионных кристаллах.
644. Lyddane R. H., Herzfeld K. F., Sachs R. G., Phys. Rev., 58, 1008 (1940). (Гл. 8, § 3 и 6.)
Электрические поля в колеблющихся ионных кристаллах.
645. Lyddane R. H., Sachs R. G., Teller E., Phys. Rev., 59, 673 (1941). (Гл. 8, § 3 и 6.)
О поляризационных колебаниях щелочных галоидов.
646. Madelung E., Gött. Nachr., 100 (1909); 43 (1910); Phys. Zs., 1, 898 (1910). (Гл. 8, § 5; гл. 10, § 4.)
Собственные колебания молекул.
647. Madelung E., Phys. Zs., 19, 524 (1918). (Гл. 9, § 1; гл. 10, § 4.)
Электрическое поле в системах регулярно расположенных точечных зарядов.
648. Margenau H., Zs. Phys., 64, 585 (1930).
К теории молекулярных сил в дипольных газах.
649. Margenau H., Phys. Rev., 38, 747 (1931). (Приложение 5, § 7.)
Роль квадрупольных сил в вандерваальсовом притяжении.
650. Margenau H., Rev. Mod. Phys., 11, 1 (1939). (Приложение 5, § 7.)
Вандерваальсовы силы.
651. Margenau H., Phys. Rev., 56, 1000 (1939). (Приложение 5, § 6 и 7.)
Вандерваальсов потенциал в гелии.
652. Margenau H., Phys. Rev., 63, 385 (1943). (Приложение 5, § 7.)
Силы между молекулами водорода.
653. Mauger R., Phys. Rev., 57, 653 (1940). (Гл. 3, § 11.)
Фотоэлектрические и оптические свойства натрия и бария.
654. Mauger R., Journ. Appl. Phys., 16, 653 (1945).
Электрические свойства полупроводников.
655. Maу A., Phys. Rev., 52, 339 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Энергии решетки и температуры переходов в хлориде цезия и в хлориде аммония.
656. Maуer J. E., Helmholtz L., Zs. Phys., 75, 19 (1932). (Гл. 10, § 4.)
Энергия решетки щелочных галоидов и электронное сродство галогенов.
657. Maуer J. E., Maltbie M. M., Zs. Phys., 75, 748 (1932). (Гл. 10, § 4.)
Энергии решеток окислов и сульфидов щелочноземельных элементов и электронное сродство кислорода и серы.
658. Maуer J. E., Journ. Chem. Phys., 1, 270 (1933). (Гл. 10, § 4.)
Дисперсия, поляризуемость и вандерваальсов потенциал в щелочных галоидах.
659. Maуer J. E., Journ. Chem. Phys., 1, 327 (1933). (Гл. 10, § 4.)
Энергии решеток галоидов серебра и таллия.
660. Maуer J. E., Levy R. B., Journ. Chem. Phys., 1, 647 (1933). (Гл. 10, § 4.)
Энергии решеток галоидов меди.
661. Maуer J. E., Maуer M. G., Phys. Rev., 43, 605 (1933). (Гл. 10, § 4.)
Поляризуемости ионов, полученные по спектральным данным.

662. Mayer J. E. (см. [172, 205]).
663. Michels A., de Boer J., Bijl A., *Physica*, **4**, 981 (1937). (Приложение 5, § 7.)
Молекулярное взаимодействие и поляризуемость.
664. Misra R. D., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **36**, 173 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Об устойчивости кристаллических решеток. II.
665. Misra R. D. (см. [210]).
666. Møller C., *Zs. Phys.*, **66**, 513 (1930).
О высших борновских приближениях в теории столкновений.
667. Møller C., *Zs. Phys.*, **70**, 786 (1931).
О столкновении двух частиц с учетом запаздывания взаимодействия.
668. Montroll E. W., *Journ. Chem. Phys.*, **10**, 218 (1942). (Гл. 8, § 5.)
Спектр частот кристаллических твердых тел.
669. Montroll E. W., *Journ. Chem. Phys.*, **11**, 481 (1943); **12**, 111 (1944). (Гл. 8, § 5.)
Спектр частот кристаллических твердых тел. II. Общая теория и приложения к простым кубическим решеткам.
670. Montroll E. W., Peaslee D. C., *Journ. Chem. Phys.*, **12**, 98 (1944). (Гл. 8, § 5.)
Спектр частот кристаллических твердых тел. III. Объемноцентрированные кубические решетки.
671. Mott N. F., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **25**, 304 (1928).
Квантовая теория рассеяния электронов гелием.
672. Mott N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A124**, 425 (1929).
Рассеяние быстрых электронов атомными ядрами.
673. Mott N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A127**, 658 (1930).
Рассеяние электронов атомами.
674. Mott N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A135**, 429 (1932).
Поляризация электронов при двойном рассеянии.
675. Mott N. F., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **27**, 255 (1933).
О влиянии сил излучения на рассеяние электронов.
676. Mott N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A146**, 465 (1934).
Сопротивление жидких металлов.
677. Mott N. F., *Proc. Phys. Soc.*, **46**, 680 (1934).
Проводимость металлов.
678. Mott N. F., Zepher C., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **30**, 249 (1934). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства металлов.
679. Mott N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A153**, 699 (1936).
Электропроводность переходных металлов.
680. Mott N. F., *Proc. Roy. Soc.*, **A156**, 368 (1936).
Сопротивление и термоэлектрические свойства переходных металлов.
681. Mott N. F., *Phil. Mag.*, **32**, 287 (1936). (Гл. 3, § 11.)
Оптические константы медно-никелевых сплавов.
682. Mott N. F., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **32**, 108 (1936).
Термические свойства не полностью вырожденного газа.
683. Mott N. F., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **32**, 281 (1936).
Электрическое сопротивление разбавленных твердых растворов.
684. Mott N. F., *Proc. Phys. Soc.*, **49**, 258 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Энергия сверхрешетки в β -латуни.
685. Mott N. F., *Proc. Phys. Soc.*, **49**, 354 (1937). (Гл. 3, § 11.)
Теоретическая интерпретация оптических констант медно-цинковых сплавов.
686. Mott N. F., *Sci. Progr.*, **123**, 414 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Силы связи в металлах.

687. Mott N. F., Proc. Roy. Soc., A167, 384 (1938). (Гл. 5, § 5.)
О поглощении света кристаллами.
688. Mott N. F., Proc. Phys. Soc., 50, 196 (1938).
Замечание к теории фотопроводимости.
689. Mott N. F., Littleton M. J., Trans. Faraday Soc., 34, 485 (1938).
Проводимость ионных кристаллов. I. Электролитическая проводимость твердых солей.
690. Mott N. F., Sci. Progr., 32, 648 (1938).
Электропроводность ионных кристаллов.
691. Mott N. F., Rep. Progr. Phys., 5, 46 (1939).
Последние теории жидкого состояния.
692. Mott N. F., Trans. Faraday Soc., 35, 364 (1939).
Замечание к теории жидкостей.
693. Mott N. F. (см. [411, 446—448, 548]).
694. Mrowka B., Zs. Phys., 80, 495 (1933).
Диаманитная восприимчивость и преломление в волновой механике.
695. Mueller H., Phys. Rev., 47, 947 (1935).
Теория фотоупругого эффекта в кубических кристаллах.
696. Nagamiya T., Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 25, 540 (1943). (Гл. 10, § 4.)
К теории переходов твердых галогенидов аммония при низких температурах. II. Бромистый аммоний.
697. Neugebauer T., Gombas P., Zs. Phys., 89, 480 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Расчет постоянной решетки хлористого калия.
698. Neugebauer T., Zs. Phys., 90, 693 (1934). (Гл. 10, § 4.)
К теории энергии поляризации в кубической решетке.
699. Niessen K. F., Physica, 1, 783 (1934).
Соотношение между диа- и парамагнитной восприимчивостями электронного газа как функция напряженности поля.
700. Niessen K. F., Physica, 1, 979 (1934).
Температурная зависимость электронного газа.
701. Nishikawa S., Kikuchi S., Nature, 121, 1019 (1928).
Дифракция катодных лучей в слюде.
702. Niven C. D., Phil. Mag., 3, 1314 (1927).
Химическая валентность.
703. Niven C. D., Phil. Mag., 21, 291 (1936).
Концепция металлического состояния по Юм-Розери.
704. Nix F. C., Shockley W., Rev. Mod. Phys., 10, 1 (1938).
Переходы порядок — беспорядок в сплавах.
705. Nordheim L. W., Proc. Roy. Soc., A119, 173 (1928).
О кинетическом методе в новой статистике и о его приложении к электронной теории проводимости.
706. Nordheim L. W., Müller-Pouillet Lehrbuch Physik, 1, 293 (1934).
Кинетическая теория металлического состояния.
707. Nordheim L. W., Helv. Phys. Acta, 7 (Suppl. 2), 3 (1934).
О пределах применимости элементарной электронной теории металлов.
708. Nordheim L. W. (см. [184, 738]).
709. Norton K. A., Nature, 132, 676 (1933). (Гл. 5, § 3.)
Ионизация ионосферы
710. Оке В. У., Proc. Natl. Acad. Sci. Ind., 4, 1, 514 525, 667 (1936). (Гл. 10, § 4.)
Теория решеток щелочноземельных карбонатов. I. Энергия решеток кристаллов типа арагонита и ее термохимические применения. II. Упру-

- гие постоянные арагонита. III. Энергия решетки кристаллов кальцита и ее термодинамические приложения. IV. Упругие постоянные кальцита.
711. Oke B. Y., Proc. Natl. Acad. Sci. Ind., 5, 326 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Теория решетки щелочноземельных карбонатов.
712. Ornstein L. S., Kramers H. A., Zs. Phys., 42, 481 (1927).
К кинетическому выводу закона распределения Ферми.
713. Orowan E., Zs. Krist., 89, 327 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Свойства механического сцепления и «реальная» структура кристаллов.
714. Orowan E., Int. Conf. Phys. Proc., London, vol. II, 1934, Solid State of Matter, p. 81, (Гл. 10, § 4.)
Разрыв пластичных кристаллов.
715. Ott H., Ann. Phys., 23, 169 (1936). (Гл. 7, § 3.)
Влияние температуры на рентгеновское рассеяние в твердых телах согласно квантовой механике.
716. Patterson A. L., Phys. Rev., 46, 372 (1934).
Метод фурье-синтеза для определения компонент межатомных расстояний в кристаллах.
717. Patterson A. L., Zs. Krist., 90, 517 (1935).
Прямой метод определения компонент межатомных расстояний в кристаллах.
718. Pauli W. Jr., Zs. Phys., 2, 201 (1920).
Теоретические замечания о диамагнетизме одноатомных газов.
719. Pauli W. Jr., Zs. Phys., 41, 81 (1927).
О вырождении газа и парамагнетизме.
720. Pauli W. Jr., Zs. Phys., 80, 573 (1933).
Некоторые вопросы в связи с квантовой механикой.
721. Pauling L., Zs. Krist., 69, 35 (1928).
О переходе, обусловленном давлением, в галоидах рубидия.
722. Pauling L., Phys. Rev., 34, 954 (1929).
Фотоионизация в жидкостях и кристаллах и зависимость частоты края рентгеновского поглощения от химического строения.
723. Pauling L., Phys. Rev., 36, 430 (1930).
Вращательное движение молекул в кристаллах.
724. Pauling L., Beach J. Y., Phys. Rev., 47, 686 (1935). (Приложение 5, § 4 и 7.)
Вандерваальсово взаимодействие атомов водорода.
725. Pauling L., Journ. Chem. Phys., 4, 673 (1936).
Диамагнитная анизотропия ароматических молекул.
726. Peierls R., Zs. Phys., 53, 255 (1929). (Гл. 2, § 4.)
К теории гальваномагнитных эффектов.
727. Peierls R., Ann. Phys., 3, 1055 (1929). (Гл. 7, § 2.)
К кинетической теории теплопроводности кристаллов.
728. Peierls R., Ann. Phys., 4, 121 (1930).
К теории электропроводности и теплопроводности металлов.
729. Peierls R., Ann. Phys., 5, 244 (1930).
Два замечания к теории проводимости.
730. Peierls R., Leipziger Vorträge, 1930, Leipzig, S. 75. (Гл. 3, § 10.)
Поведение металлических проводников в сильных магнитных полях.
731. Peierls R., Ann. Phys., 10, 97 (1931). (Гл. 3, § 10.)
К теории изменения сопротивления в магнитном поле.
732. Peierls R., Ann. Phys., 12, 154 (1932).
К вопросу об электрическом сопротивлении при низких температурах.
733. Peierls R., Ann. Phys., 13, 905 (1932). (Гл. 5, § 5.)
К теории спектров поглощения твердых тел.

734. Peierls R., Zs. Phys., 80, 763 (1933); 81, 186 (1933). (Гл. 3, § 9.)
К теории диамагнетизма электронов проводимости.
735. Peierls R., Zs. Phys., 88, 786 (1934).
Замечания к теории металлов.
736. Peierls R., Helv. Phys. Acta, 7 (Suppl. 2), 24 (1934).
О статистических основах электронной теории металлов.
737. Peierls R., Proc. Roy. Soc., A154, 207 (1936).
Статистическая теория сверхрешеток с неравными концентрациями компонент.
738. Peterson E. L., Nordheim L. W., Phys. Rev., 51, 355 (1937).
Сопrotивление одновалентных металлов.
739. Power S. C., Proc. Cambr. Phil. Soc., 38, 61 (1942). (Гл. 10, § 4.)
Об устойчивости кристаллических решеток. VII. Длинноволновая и коротковолновая стабильность гранецентрированной кубической решетки.
740. Prins J. A., Nature, Aug. 6 (1927). (Гл. 5, § 5.)
Полное отражение рентгеновских лучей.
741. Prins J. A., Zs. Phys., 47, 479 (1928). (Гл. 5, § 5.)
О дисперсии и поглощении рентгеновских лучей.
742. Prins J. A., Zs. Phys., 63, 477 (1930). (Гл. 5, § 5.)
Отражение рентгеновских лучей от поглощающих идеальных кристаллов.
743. Prins J. A., Zs. Phys., 82, 690 (1934). (Гл. 5, § 5.)
Замечание к работе Ф. Йенга и Г. Стопса «Угловая зависимость коэффициента преломления рентгеновских лучей».
744. Prins J. A. (см. [273]).
745. Прокофьев В., Zs. Phys., 58, 255 (1929). (Гл. 11, § 4.)
Расчет числа дисперсионных центров в натрии.
746. Rayleigh, Phil. Mag., 34, 481 (1892). (Гл. 6, § 1.)
О влиянии препятствий, расположенных в прямоугольном порядке, на свойства среды.
747. Рыжанов С., Zs. Phys., 89, 806 (1934).
К вопросу о «движении электронов» в ограниченных кристаллических решетках.
748. Robertson J. M., Rep. Progr. Phys., 4, 332 (1937).
Рентгеновский анализ и приложение метода фурье-синтеза к исследованию структуры молекул.
749. Rosenfeld L., Zs. Phys., 52, 161 (1928). (Гл. 5, § 5.)
Квантовомеханическая теория естественной оптической активности жидкости и газа.
750. Rosenfeld L., Zs. Phys., 57, 838 (1929). (Гл. 3, § 8.)
К теории эффекта Фарадея.
751. Rosenfeld L. (см. [882]).
752. Rosenthal J., Murphy G., Rev. Mod. Phys., 8, 317 (1936). (Гл. 8, § 6.)
Теория групп и колебания многоатомных молекул.
753. Rudberg E., Slater J. C., Phys. Rev., 50, 150 (1936). (Гл. 5, § 3.)
Теория неупругого рассеяния электронов в твердых телах.
754. Ruthemann G., Naturwiss., 29, 648 (1941). (Гл. 5, § 3.)
Дискретные потери энергии быстрых электронов в твердых телах.
755. Sarginson K., Proc. Roy. Soc., A180, 305 (1942). (Гл. 8, § 1.)
Влияние тепловых колебаний на рассеяние рентгеновских лучей. II.
756. Sarginson K. (см. [211]).
757. Schottky W., Phys. Zs., 21, 232 (1920). (Гл. 10, § 4.)
Условие равновесия в теории электромагнитного строения материи.

758. Schottky W., Zs. Phys., 118, 539 (1941). (Приложение 2, § 2.)
Упрощенная и обобщенная теория выпрямляющего граничного слоя.
759. Schrödinger E., Phys. Zs., 15, 79 (1914).
О резкости рентгеновских интерференционных картин.
760. Schrödinger E., Phys. Zs., 15, 497 (1914). (Гл. 8, § 6.)
К теории эффекта Дебая.
761. Schrödinger E., Zs. Phys., 11, 170 (1922). (Гл. 8, § 6.)
О теплоемкости твердых тел при высоких температурах и о квантовании колебаний конечной амплитуды.
762. Шубин С., Phys. Zs. Sowjetunion, 5, 81 (1934).
К теории жидких металлов.
763. Шубников Л., de Haas W. J., Leiden Commun., 207d, 210a, b, (1930). (Гл. 3, § 10.)
Новые явления, связанные с изменением сопротивления в магнитном поле при температуре жидкого водорода, I, II.
764. Seeger R. J., Teller E., Phys. Rev., 54, 515 (1938). (Гл. 3, § 11.)
Об электрическом пробое щелочногаллоидных кристаллов.
765. Seeger R. J., Teller E., Phys. Rev., 56, 352 (1939).
Замечания о диэлектрическом пробое.
766. Serber R., Phys. Rev., 41, 489 (1932).
Теория эффекта Фарадея в молекулах.
767. Sherman J., Chem. Rev., 11, 93 (1932). (Гл. 10, § 4.)
Энергии ионных кристаллов и термохимические применения.
768. Sherman J., Zs. Krist., 87, 342 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Постоянная Маделунга для куприта. Поправка.
769. Shoenberg D., Uddin M. Z., Proc. Roy. Soc., A156, 687, 701 (1936). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнитные свойства висмута. I. Зависимость восприимчивости от температуры и от добавок других элементов. II. Эффект де Газа — ван Альфена.
770. Shoenberg D., Prod. Roy. Soc., A170, 341 (1939). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнитные свойства висмута. III. Дальнейшие измерения эффекта де Газа — ван Альфена.
771. Slater J. C., Phys. Rev., 23, 488 (1924). (Гл. 9, § 2; гл. 10, § 4.)
Сжимаемость щелочных галоидов.
772. Slater J. C., Proc. Natl. Acad. Sci. U. S., 13, 423 (1927). (Гл. 11, § 4.)
Структура атома гелия. I.
773. Slater J. C., Phys. Rev., 32, 349 (1928). (Приложение 5, § 6.)
Нормальное состояние гелия.
774. Slater J. C., Phys. Rev., 35, 509 (1930). (Гл. 10, § 4.)
Силы связи в одновалентных металлах.
775. Slater J. C., Kirkwood J. G., Phys. Rev., 37, 682 (1931). (Приложение 5, § 3 и 7.)
Вандерваальсовы силы в газах.
776. Slater J. C., Phys. Rev., 38, 237 (1931). (Гл. 10, § 4.)
Квантовая теория уравнения состояния.
777. Slater J. C., Science, 77, 595 (1933).
Электронная теория металлической проводимости.
778. Slater J. C., Rev. Mod. Phys., 6, 209 (1934). (Гл. 10, § 1 и 4.)
Электронная структура металлов.
779. Slater J. C., Krutter H. M., Phys. Rev., 47, 559 (1935). (Гл. 10, § 1.)
Метод Томаса — Ферми для металлов.
780. Slater J. C., Shockley W., Phys. Rev., 50, 705 (1936). (Гл. 3, § 11; приложение 2, § 1.)
Оптическое поглощение щелочногаллоидных кристаллов.

781. Slater J. C., Journ. Franklin Inst., 225, 277 (1938).
Электродинамика материальных тел.
782. Slater J. C., Trans. Faraday Soc., 34, 828 (1938). (Гл. 5, § 5.)
Возбужденные энергетические уровни изолирующих кристаллов.
783. Slater J. C., Phys. Rev., 57, 744 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Замечания о постоянной Грюнайзена для несжимаемых металлов.
784. Slater J. C., Journ. Chem. Phys., 9, 16 (1941). (Гл. 8, § 5.)
Теория перехода в KN_2PO_4 .
785. Slater J. C. (см. [753]).
786. Smith R. A., Proc. Camb. Phil. Soc., 30, 520 (1934).
Влияние обмена на поляризацию электронов при двойном рассеянии.
787. Sommerfeld A., Naturwiss., 41, 825 (1927).
К электронной теории металлов.
788. Sommerfeld A., Zs. Phys., 47, 1 (1928). (Гл. 1, § 4.)
К электронной теории металлов на основе статистики Ферми.
789. Sommerfeld A., Zs. Phys., 47, 43 (1928). (Гл. 2, § 4.)
К электронной теории металлов на основе статистики Ферми. II. Термоэлектрические, гальваномангнитные и термомагнитные явления.
790. Sommerfeld A., Frank N. H., Rev. Mod. Phys., 3, 1 (1931). (Гл. 2, § 4.)
Статистическая теория термоэлектрических, гальваномангнитных и термомагнитных явлений в металлах.
791. Sommerfeld A., Bethe H., Elektronentheorie der Metalle, «Handbuch der Physik», 2te Hrg., Bd. 24, Tl. 2, Berlin, 1933. (См. перевод: Г. Бете, А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, М. — Л., 1938.)
792. Sommerfeld A., Phys. Rev., 45, 65 (1934).
О термоэлектрических явлениях в щелочных металлах.
793. Sommerfeld A., Bartlett V. W., Phys. Zs., 36, 894 (1935). (Гл. 3, § 10.)
О продольном изменении сопротивления в магнитном поле по простейшей теории
794. Sponer H., Bruch-Wilstätter M., Journ. Chem. Phys., 5, 745 (1937). (Гл. 10, § 4.)
Энергия решетки твердого CO_2 .
795. Stueckelberg E. C. G., Morse P. M., Zs. Phys., 69, 666 (1931).
Теплоемкость квазисвободных электронов.
796. Sugiyama Y., Journ. Phys. Rad., 8, 113 (1927). (Приложение 5, § 2.)
О числе дисперсионных электронов для непрерывных спектров и для спектров водородной серии.
797. Szigeti B., Trans. Faraday Soc., 45, 155 (1935). (Гл. 8, § 6.)
Поляризуемость и диэлектрическая проницаемость ионных кристаллов.
798. Гамм И., Блохинцев Д., Zs. Phys., 77, 774 (1932).
О работе выхода электронов в металлах.
799. Taylor G. I., Proc. Roy. Soc., A145, 362 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Пластическая деформация кристаллов.
800. Taylor G. I., Proc. Roy. Soc., A145, 405 (1934). (Гл. 10, § 4.)
Твердость каменной соли.
801. Teller E., Journ. Phys. Chem., 41, 109 (1937).
Пересечение потенциальных поверхностей.
802. Teller E. (см. [141, 645, 764, 765]).
803. Thomas L. H., Proc. Camb. Phil. Soc., 23, 542 (1927). (Гл. 10, § 1.)
Расчет атомных полей.

804. Thomson G. P., Reid A., Nature, 119, 890 (1927).
Дифракция катодных лучей от тонкой пленки.
805. Thomson G. P., Nature, 120, 802 (1927).
Дифракция катодных лучей от тонких пленок платины.
806. Thomson G. P., Nature, 122, 279 (1928).
Электронные волны.
807. Thomson G. P., Proc. Roy. Soc., A117, 600 (1928); A119, 651 (1928).
Опыты по дифракции катодных лучей.
808. Thomson G. P., Blackman M., Proc. Phys. Soc., 51, 425 (1939).
Теория ширины колец, возникающих при дифракции электронов.
809. Tonks L., Langmuir I., Phys. Rev., 33, 195 (1929). (Гл. 5, § 2.)
Колебания в ионизированных газах.
810. Tonks L., Nature, 132, 101, 710 (1933). (Гл. 5, § 3.)
Плотность ионизации и критическая частота.
811. Ufford C. W., Phys. Rev., 59, 598 (1941).
Взаимодействие электронов в металлах и диэлектриках.
812. Unsöld A., Naturwiss., 15, 681 (1927). (Гл. 10, § 4.)
О теории решеточных сил Борна — Ланде.
813. Unsöld A., Zs. Phys., 43, 563 (1927). (Гл. 10, § 4; приложение 5, § 7.)
Квантовая теория молекулярного иона водорода и сил отталкивания Борна — Ланде.
814. Verwey E. J. W., de Boer J. H., Rev. Trav. Chim., 59, 633 (1940). (Гл. 10, § 4.)
Потенциальные кривые для молекул щелочных галоидов.
815. Vinti J. P., Phys. Rev., 41, 813 (1932). (Приложение 5, § 7.)
Соотношение между электрической и диамагнитной восприимчивостями одноатомных газов.
816. Von Hippel A., Ergebn. Exakt. Naturwiss., 14, 79 (1935).
Электрический пробой твердых и жидких диэлектриков.
817. Von Hippel A., Zs. Phys., 101, 180 (1936). (Гл. 5, § 5.)
Некоторые принципиальные замечания о спектроскопии ионных кристаллов и ее применении к щелочным галоидам.
818. Von Hippel A., Journ. Appl. Phys., 8, 815 (1937).
Электрический пробой твердых и жидких диэлектриков.
819. Von Laue M., Math.-Phys. Kl. Bayer. Akad. Wiss., 363 (1912); App. Phys., 41, 989 (1913). (Гл. 6, § 1.)
Количественная проверка теории интерференции рентгеновских лучей.
820. Von Laue M., Tank F., App. Phys., 41, 1003 (1913).
Форма интерференционных пятен при интерференции рентгеновских лучей.
821. Von Laue M., App. Phys., 42, 397 (1913).
Рентгенограммы с тройной симметрией от идеальных кристаллов.
822. Von Laue M., App. Phys., 42, 1561 (1913).
О влиянии температуры на интерференцию рентгеновских лучей.
823. Von Laue M., App. Phys., 50, 433 (1916).
О симметрии рентгенограмм кристаллов.
824. Von Laue M., App. Phys., 56, 497 (1918).
Интерференция рентгеновских лучей и смешанные кристаллы.
825. Von Laue M., Enz. Math. Wiss., V3, 359 (1923).
Волновая оптика.
826. Von Laue M., App. Phys., 78, 167 (1925).
Об интерференции рентгеновских лучей в смешанных кристаллах.
827. Von Laue M., App. Phys., 81, 877 (1926).
Влияние температуры на интерференцию рентгеновских лучей.

828. Von Laue M., Zs. Krist., **64**, 115 (1926).
Фактор Лорентца и распределение интенсивности в кольцах Де-бая — Шерера.
829. Von Laue M., Zs. Krist., **65**, 493 (1927).
Влияние температуры на интерференцию рентгеновских лучей.
830. Von Laue M., Ann. Phys., **4**, 1121 (1930).
Замечание к динамике граничных слоев кристаллов типа NaCl.
831. Von Laue M., Ergeb. Exakt. Naturwiss., **10**, 133 (1931). (Гл. 6, § 3.)
Динамическая теория интерференции рентгеновских лучей в новой форме.
832. Von Laue M., Phys. Rev., **37**, 55 (1931).
Дифракция электронной волны от монокристаллического слоя.
833. Von Laue M., Ann. Phys., **23**, 705 (1935).
Рентгеновская флуоресценция монокристаллов.
834. Von Laue M., Berlin, 1935.
Интерференция рентгеновских и электронных лучей. Пять докладов.
835. Von Laue M., Ann. Phys., **26**, 55 (1936).
Влияние внешней формы кристаллов на интерференцию и пространственную решетку.
836. Von Laue M. (см. [601]).
837. Voss W., Zs. Phys., **83**, 581 (1933).
Условия появления эффекта Рамзауэра.
838. Wall C. N., Phil. Mag., **3** (Suppl.), 660 (1927). (Гл. 10, § 4.)
Потенциал системы электрических зарядов.
839. Wall C. N., Phys. Rev., **36**, 1243 (1930). (Гл. 10, § 4.)
Потенциал и потенциальная энергия пространственных решеток.
840. Waller I., Zs. Phys., **17**, 398 (1923). (Гл. 7, § 1.)
К вопросу о влиянии теплового движения на интерференцию рентгеновских лучей.
841. Waller I., Диссертация, Uppsala, 1925. (Гл. 7, § 1 и 3.)
Теория интерференции и дисперсии рентгеновских лучей.
842. Waller I., Zs. Phys., **38**, 635 (1926). (Приложение 5, § 3.)
Эффект Штарка второго порядка в водороде и поправка Ридберга для спектров He и Li⁺.
843. Waller I., James R. W., Proc. Roy. Soc., **A117**, 214 (1927).
Температурные множители рентгеновского отражения для натрия и хлора в кристалле каменной соли.
844. Waller I., Ann. Phys., **83**, 153 (1927).
Влияние теплового движения атомов кристаллов на интенсивность и резкость рентгеновских спектральных линий.
845. Waller I. (см. [525]).
846. Wannier G. H., Phys. Rev., **52**, 191 (1937). (Приложение 2, § 1.)
Структура возбужденных электронных уровней в изолирующих кристаллах.
847. Warren B. E., Gingrich N. S., Phys. Rev., **46**, 368 (1934).
Фурье-анализ рентгеновских и дифракционных картин от порошков.
848. Wasastjerne J. A., Soc. Sci. Fennica, **6**, 22 (1932—1933). (Гл. 10, § 4.)
Силы между атомами и ионами.
849. Wasastjerne J. A., Soc. Sci. Fennica, **8**, 8 (1935). (Гл. 10, § 4.)
Атомная теория сжимаемости.
850. Wasastjerne J. A., Soc. Sci. Fennica, **8**, 9 (1935). (Гл. 10, § 4.)
Упругие постоянные щелочногалогидных кристаллов.
851. Wasastjerne J. A., Soc. Sci. Fennica, **8**, 20 (1935). (Гл. 10, § 4.)
Силы, действующие между атомами и ионами, и упругие свойства кристаллов.

852. Wasastjerne J. A., Soc. Sci. Fennica, 8, 21 (1935). (Гл. 10, § 4.)
Расчет физических свойств кристаллов.
853. Wasastjerne J. A., Phil. Trans. Roy. Soc., A237, 105 (1938). (Гл. 10, § 4.)
Силы, действующие между атомами и ионами, и физические свойства объема вещества.
854. Weisskopf V. F., Zs. Phys., 93, 561 (1935).
О поляризации электронов при рассеянии на кристаллах.
855. Weisskopf V. F., Amer. Journ. Phys., 11, 1 (1943).
О теории электрического сопротивления металлов.
856. Wentzel G., Zs. Phys., 40, 590 (1927).
Два замечания о рассеянии корпускулярных лучей как явлении преломления.
857. Wentzel G., Zs. Phys., 43, 1 (1927). (Гл. 1, § 5.)
К теории эффекта Комптона.
858. Wentzel G., Zs. Phys., 43, 524 (1927).
О безызлучательных квантовых переходах.
859. Wentzel G., Zs. Phys., 43, 779 (1927). (Гл. 1, § 5.)
К теории эффекта Комптона. II.
860. Wentzel G., Zs. Phys., 58, 348 (1929). (Гл. 1, § 5.)
Об отдаче при эффекте Комптона на атоме водорода.
861. Wentzel G., Wellenmechanik der Stoss- und Strahlungsvorgänge, «Handbuch der Physik», 2te Hgr., Bd. 24/1, Berlin, 1933, S. 695.
Волновая механика процессов столкновения и излучения.
862. West J., Zs. Krist., 74, 306 (1930). (Гл. 8, § 5.)
Количественный рентгеновский анализ структуры дигидрофосфата калия KH_2PO_4 .
863. West J. (см. [236]).
864. Wigner E., Gött. Nachr., 133 (1930). (Гл. 8, § 6.)
Об упругих собственных колебаниях симметричных систем.
865. Wigner E., Seitz F., Phys. Rev., 43, 804 (1933); 46, 509 (1934). (Гл. 10, § 2 и 3; гл. 11, § 4.)
О строении металлического натрия.
866. Wigner E., Phys. Rev., 46, 1002 (1934). (Гл. 10, § 3 и 4; гл. 11, § 4.)
О взаимодействии электронов в металлах.
867. Wigner E., Bardeen J., Phys. Rev., 48, 84 (1935).
Теория работы выхода одновалентных металлов.
868. Wigner E., Huntington H. B., Journ. Chem. Phys., 3, 764 (1935). (Гл. 10, § 4.)
О возможности металлической модификации водорода.
869. Wigner E., Phys. Rev., 49, 696 (1936).
О постоянной A в формуле Ричардсона.
870. Wigner E., Trans. Faraday Soc., 34, 678 (1939). (Гл. 10, § 3 и 4.)
Влияние межэлектронного взаимодействия на энергетические уровни электронов в металлах.
871. Williams E. J., Phil. Mag., 2, 657 (1926). (Гл. 1, § 5.)
Эффект Комптона и отражение рентгеновских лучей от кристаллов.
872. Williams E. J., Proc. Roy. Soc., A143, 358 (1934). (Гл. 5, § 5.)
Аномальная дисперсия и поглощение рентгеновских лучей.
873. Williams E. J., Rev. Mod. Phys., 17, 217 (1945).
Использование обычных пространственно-временных концепций в задачах теории столкновений и связь классической теории с борновским приближением.
874. Williams E. J. (см. [238]).
875. Wilson A. H., Proc. Roy. Soc., A136, 487 (1932).
Замечание к теории выпрямления.

876. Wilson A. H., *Actualités Sci. et Ind.*, **82** (1934).
Электрические свойства полупроводников и диэлектриков.
877. Wilson A. H., *Proc. Roy. Soc.*, **A151**, 274 (1935). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства твердых тел.
878. Wilson A. H., *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **33**, 371 (1937).
Электрические эффекты второго порядка в металлах.
879. Wilson A. H., *Proc. Roy. Soc.*, **A167**, 580 (1938).
Электропроводность переходных металлов.
880. Winter J., *Compt. Rend.*, **202**, 1265 (1936).
О поляризации волн Дирака.
881. Winter J., *Compt. Rend.*, **202**, 1416 (1936).
О рассеянии волн Дирака.
882. Witmer E., Rosenfeld L., *Zs. Phys.*, **48**, 530 (1928).
О дифракции волн де Бройля на кристаллических решетках.
883. Wood R. W., *Phys. Rev.*, **41**, 21 (1932).
Рассеяние рентгеновских лучей в газах и кристаллах.
884. Wood R. W., *Phys. Rev.*, **44**, 353 (1933). (Гл. 5, § 3 и 5.)
Замечательные оптические свойства щелочных металлов.
885. Wood R. W., Lukens C., *Phys. Rev.*, **54**, 332 (1938). (Гл. 5, § 3 и 5.)
Оптические свойства щелочных металлов.
886. Zachariasen W. H., *Phys. Rev.*, **57**, 597 (1940). (Гл. 8, § 1.)
Теоретическое изучение диффузного рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах.
887. Zachariasen W. H., *Phys. Rev.*, **59**, 860 (1941). (Гл. 8, § 1.)
Температурное диффузное рассеяние в простой кубической решетке.
888. Zachariasen W. H., *Phys. Rev.*, **60**, 691 (1941). (Гл. 8, § 1.)
К теории температурного диффузного рассеяния.
889. Zener C., *Proc. Roy. Soc.*, **A137**, 696 (1932).
Неадиабатическое пересечение энергетических уровней.
890. Zener C., *Nature*, **132**, 968 (1933). (Гл. 5, § 3 и 5.)
Замечательные оптические свойства щелочных металлов.
891. Zener C., *Proc. Roy. Soc.*, **A145**, 529 (1934). (Приложение 1, § 2.)
Теория электрического пробоя твердых диэлектриков.
892. Zener C., *Phys. Rev.*, **47**, 636 (1935). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Постоянные Холла щелочных металлов.
893. Zener C., Jauncey G. E. M., *Phys. Rev.*, **49**, 17 (1936). (Гл. 8, § 1.)
Теория влияния температуры на отражение рентгеновских лучей от кристаллов. I. Изотропные кристаллы.
894. Zener C., *Phys. Rev.*, **49**, 122 (1936). (Гл. 8, § 1.)
Теория влияния температуры на отражение рентгеновских лучей от кристаллов. II. Анизотропные кристаллы.
895. Zener C., Bilinsky S., *Phys. Rev.*, **50**, 101 (1936). (Гл. 8, § 1.)
Теория влияния температуры на отражение рентгеновских лучей от кристаллов. III. Высокие температуры. Анизотропные кристаллы.
896. Zener C. (см [544, 678]).

2. Статьи с 1946 г.

897. Aamodt R. E., *Phys. Rev.*, **138**, A45 (1965). (Гл. 11, § 7.)
Нелинейная динамика продольных колебаний в однородной бесстолкновительной плазме с внешним магнитным полем.
898. Abe Y., Osaka Y., Morita A., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **17**, 1576 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Коллективные возбужденные состояния и диэлектрическая проницаемость диэлектриков.

899. Abeles B., Meiboom S., Phys. Rev., 95, 31 (1954). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Теория гальваномагнитных эффектов в германии.
900. Abeles B., Meiboom S., Phys. Rev., 101, 544 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в висмуте.
901. Abeles B. (см. [4466]).
902. Abrahams M. S., Braunstein R., Rosi F. D., Journ. Phys. Chem. Solids, 10, 204 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Тепловые электрические и оптические свойства (In—Ga)As сплавов.
903. Абрикосов А. А., ЖЭТФ, 44, 1632 (1963). (Гл. 3, § 11.)
О числе «свободных носителей» в металлах типа висмута при высоких температурах.
904. Adams A. R., Spear W. E., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 1113 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Перенос заряда в кристаллах орторомбической серы.
905. Adams E. N., Phys. Rev., 98, 947 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Плазменные колебания в металлах.
906. Adams E. N., Phys. Rev., 98, 1130 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Дополнительные условия в теории электронного газа по Бому и Пайнсу.
907. Adams E. N., Argures P. N., Phys. Rev., 102, 605 (1956).
Ускорение электронов внешним силовым полем.
908. Adams E. N., Phys. Rev., 107, 671 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Расчет Васильева собственной энергии электрона в полупроводниках.
909. Adams E. N., Phys. Rev., 107, 698 (1957).
Определение энергетических зон в присутствии внешнего силового поля.
910. Adams E. N., Holstein T. D., Journ. Phys. Chem. Solids, 10, 254 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Квантовая теория поперечных гальваномагнитных явлений. (1959).
911. Adams E. N., Blount E. I., Journ. Phys. Chem. Solids, 10, 286 (1959).
Энергетические зоны в присутствии внешнего силового поля. II. Аномальные скорости.
912. Adams E. N., Keyes R. W., Progr. Semicond., 6, 85 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные явления в очень сильных магнитных полях.
913. Adams E. N. (см. [1012, 2305]).
914. Adams W. H., Phys. Rev., 127, 1650 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Устойчивость состояний Хартри — Фока.
915. Adams W. H., Journ. Chem. Phys., 39, 23 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Корреляционные эффекты в приближении альтернантных молекулярных орбит.
916. Adawi I., Phys. Rev., 105, 789 (1957).
Одномерная трактовка эффективной массы в полупроводниках.
917. Адирович Э. И., ФТТ, 2, 1410 (1960).
Электрические поля и токи в диэлектриках.
918. Адирович Э. И., ФТТ, 2, 2384 (1960).
Кинетика примесной фотопроводимости и эффективные сечения локальных центров.
919. Адирович Э. И., Кузнецова Е. М., ФТТ, 3, 3339 (1961).
О возможности инверсного распределения электронов в вырожденных полупроводниках.

920. Adler S. L., Phys. Rev., **126**, 413 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Квантовая теория диэлектрической проницаемости в реальных твердых телах.
921. Адрианов Д. Г., Фистуль В. И., ФТТ, **6**, 470 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление сильно легированного германия *n*-типа в слабых магнитных полях.
922. Аэро Э. Л., Кувшинский Е. В., ФТТ, **2**, 1399 (1960).
Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц.
923. Agasy R. L., Borland R. E., Proc. Roy. Soc., **84**, 1017 (1964).
Электронная структура одномерного случайного сплава.
924. Агаев Я., Мосанов О., ФТТ, **6**, 1380 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Электрические и гальваномагнитные свойства InSb в области собственной проводимости.
925. Агеев В. Н., Балабанова Л. А., Бредов М. М., ФТТ, **2**, 2899 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Об исследовании спектров плазмонов.
926. Агранович В. М., Оптика и спектроскопия, **1**, 338 (1956); **2**, 738 (1957).
Теория естественной оптической активности молекулярных кристаллов. I. Классическая теория. II. Квантовая теория.
927. Агранович В. М., Конобеев Ю. В., ФТТ, **5**, 2544 (1963).
К теории диэлектрической проницаемости кристаллов.
928. Ahmed M. S., Acta Cryst., **5**, 587 (1952). (Гл. 8, § 1.)
Тепловые колебания кубических кристаллов.
929. Aigrain P., des Cloiseaux J., Compt. Rend., **241**, 859 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Край оптического поглощения и эффективная масса электронов антимонида индия (InSb).
930. Aigrain P., Rigaux C., Thuilier J. M., Compt. Rend., **242**, 1145 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Термомагнитоэлектрические явления в антимониде индия.
931. Aigrain P., Nuovo Cimento, Suppl., **7**, 724 (1958).
Рекомбинационные процессы в полупроводниках.
932. Aigrain P. (см. [3603]).
933. Aizu K., Phys. Rev., **133**, A1350 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Изменения тензорных свойств при сегнетоэлектрическом переходе в регулярных сегнетоэлектриках.
934. Aizu K., Phys. Rev., **133**, A1584 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Изменение знака вращательной способности; «гиросегнетоэлектрические» и «гипергиросегнетоэлектрические» кристаллы.
935. Aizu K., Phys. Rev., **134**, A701 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Неправильные сегнетоэлектрики.
936. Aizu K., Journ. Phys. Soc. Japan, **20**, 284 (1965). (Гл. 8, § 5.)
Повторное рассмотрение сегнетоэлектриков типов *i4*, *i6*, *i3R*, *i3P-I* и *i3P-II* в связи с моментом количества движения.
937. Aizu K., Journ. Phys. Soc. Japan, **20**, 285 (1965). (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектричество и энантиоморфизм.
938. Акао Н., Sasaki T., Journ. Chem. Phys., **23**, 2210 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Дисперсия диэлектрической проницаемости сегнетовой соли в микроволновом диапазоне.
939. Ахизер А. И., Полсвин Р. В., ЖЭТФ, **30**, 915 (1956). (Гл. 11, § 7.)
К теории волновых движений электронной плазмы.

940. Ахиезер А. И., Каганов М. И., Любарский Г. Я., ЖЭТФ, 32, 837 (1957). (Гл. 3, § 9).
О поглощении ультразвука в металлах.
941. Ахиезер А. И., Барьяхтар В. Г., ФТТ, 2, 2439 (1960).
К теории теплопроводности сегнетоэлектриков при низких температурах.
942. Акрамов Г., ФТТ, 5, 1310 (1963). (Гл. 3, § 9)
Резонансное затухание звука в металле в магнитном поле.
943. Акулов Н. С., ЖЭТФ, 36, 1085 (1959). (Гл. 8, § 5.)
К теории кривых поляризации сегнетоэлектриков.
944. Alder В. J., Christian R. H., Phys. Rev. Lett., 4, 450 (1960). (Гл. 10, § 4.)
Разрушение двухатомных связей давлением.
945. Александров К. С., Кристаллография, 1, 718 (1956). (Гл. 8, § 6.)
Распространение упругих волн по особенным направлениям в кристаллах.
946. Александров К. С., Кристаллография, 2, 140 (1957). (Гл. 8, § 6.)
Распространение сдвиговых упругих волн в кристалле, закрученном вокруг особенного направления.
947. Алексеевский Н. Е., Брандт Н. Б., Костина Т. И., ЖЭТФ, 31, 943 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11).
Исследование влияния давления на гальваномагнитные свойства теллура при низких температурах.
948. Алексеевский Н. Е., Брандт Н. Б., Костина Т. И., ЖЭТФ, 34, 1339 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Об аномальных гальваномагнитных свойствах металлов при низких температурах.
949. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 35, 554 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11)
Анизотропия электрического сопротивления монокристалла золота в магнитном поле при $4,2^{\circ}\text{K}$.
950. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 36, 447 (1959). (Гл. 3, § 10.)
Измерение электропроводности металлов в магнитном поле как метод исследования поверхности Ферми.
951. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 37, 672 (1959). (Гл. 3, § 10.)
Анизотропия электропроводности в магнитном поле и топология поверхности Ферми металлов.
952. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., Лифшиц И. М., Пещанский В. Г., ЖЭТФ, 39, 1201 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми олова.
953. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 41, 354 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми свинца.
954. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 41, 1079 (1961). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о поверхности Ферми олова.
955. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 42, 69 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми серебра.
956. Алексеевский Н. Е., Гайдуков Ю. П., ЖЭТФ, 43, 2094 (1962); 44, 1421 (1963) (Гл. 3, § 10 и 11.)
Открытые сечения поверхностей Ферми кадмия, цинка и таллия.
957. Alets G. A., Fleury P. A., Phys. Rev., 129, 2425 (1963).
Изменение скорости звука в металлах в магнитном поле.

958. Alers G. A., Swim R. T., Phys. Rev. Lett., 11, 72 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Колебания скорости звука в золоте в сильных магнитных полях.
959. Alers P. B., Webber R. T., Phys. Rev., 91, 1060 (1953). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление кристаллов висмута при низких температурах.
960. Alers P. B., Phys. Rev., 101, 41 (1956). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Термическое магнетосопротивление цинка при низких температурах.
961. Alers P. B., Phys. Rev., 107, 959 (1957). (Гл. 3, § 9—11.)
Осцилляции де Гааза — ван Альфена термического и электрического магнетосопротивления олова.
962. Alfred L. C. R., March N. H., Phil. Mag., 2, 985 (1957).
Взаимодействие примесей с вакансиями в металле.
963. Allen J. W., Journ. Electronics, 1, 580 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства дислокаций в германии.
964. Allen J. W. (см. [3426]).
965. Allen L. C., Clementi E., Gladney H. M., Rev. Mod. Phys., 35, 465 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Парные корреляционные энергии.
966. Allgaier R. S., Phys. Rev., 115, 1185 (1959). (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление в многодолинной модели с эллипсоидами произвольного вида вдоль осей типа (110).
967. Allgaier R. S., Phys. Rev., 119, 554 (1960). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление p -теллурида свинца в слабом поле при комнатной температуре и 77°K .
968. Allgaier R. S., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2185 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Валентные зоны теллурида свинца.
969. Allgaier R. S., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, p. 1037. (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты и зонная структура PbS, PbSe и PbTe.
970. Алмазов А. Б., ФТТ, 1, 1844 (1959). (Гл. 8, § 5.)
О расчете функции распределения частот для колебания атомов в кристаллической решетке.
971. Алмазов А. Б., ДАН СССР, 131, 529 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Спектр идеального ферми-газа в решетке.
972. Алмазов А. Б., ФТТ, 4, 1293 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Разложение законов дисперсии для квазичастиц в кристаллах по θ -функциям.
973. Алмазов А. Б., ФТТ, 4, 1293 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Разложение дисперсионных законов квазичастиц в кристаллах в рамках θ -функции.
974. Altman S. L., Cracknell A. P., Proc. Phys. Soc., 84, 761 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми и проводимость кальция.
975. Altman S. L., Bradley C. J., Phys. Rev., 135, A1253 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми циркония.
976. Ambegaokar V., Kohn W., Phys. Rev. Lett., 2, 385 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Связь между истинной эффективной массой и оптическим поглощением в диэлектриках.
977. Ambegaokar V., Phys. Rev., 114, 488 (1959).
Тепловое сопротивление, обусловленное изотопами, при высоких температурах.

978. Ambegaokar V., Kohn W., Phys. Rev., 117, 423 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Электромагнитные свойства диэлектриков. I.
979. Ambegaokar V., Phys. Rev., 121, 91 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Электромагнитные свойства диэлектриков. II.
980. Ambegaokar V. (см. [3178], [3471]).
981. Амирханов Х. И., Баширов Б. И., Гаджиалиев М. М., ФТТ, 3, 3743 (1961). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Квантовые термомагнитные эффекты Нернста — Эттингсгаузена в InSb и InAs *n*-типа.
982. Амирханов Х. И., Баширов Б. И., Исмаилов З. А., ФТТ, 5, 2832 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в InSb в сильных импульсных магнитных полях.
983. Atogros J. L., Caput M. L., Publ. Dep. Crist. Min. (Madrid), 2, 25 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Тепловое разупорядочение.
984. Atogros J. L., Publ. Dep. Crist. Min. (Madrid), 2, 7 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Кристаллическая идеализированная модель реального кристалла.
985. Atogros J. L., Caput M. L., Publ. Dep. Crist. Min. (Madrid), 2, 155 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Изучение динамики решетки молекулярных кристаллов. III. Соотношение между тепловым расширением, колебаниями решетки и рассеянием излучения в дегидратированной щавелевой кислоте.
986. Atogros J. L., Belgrano C., Caput M. L., Publ. Dep. Crist. Min. (Madrid), 3, 5 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Изучение динамики решетки молекулярных кристаллов. V. Прямое определение амплитуды тепловых колебаний.
987. Atogros J. L. (см. [1491, 4735]).
988. Anderson J. R., Gold A. F., Phys. Rev. Lett., 10, 227 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена и внутреннее поле в железе.
989. Anderson P. W., Phys. Rev., 100, 749 (1955). (Гл. 3, § 8.)
Электромагнитная теория циклотронного резонанса в металлах.
990. Andrew E. R., Proc. Phys. Soc., A62, 77 (1949). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 1.)
Изменение сопротивления ртути и олова, обусловленное изменением размеров.
991. Apex B. G., Simpson W. T., Rev. Mod. Phys., 32, 466 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Металлическое отражение от молекулярных кристаллов.
992. Ансельм А. И., ЖТФ, 21, 489 (1951).
Некоторые проблемы электронной теории кристаллов.
993. Ансельм А. И., Работников Ю. Л., ЖТФ, 27, 1723 (1957). (Гл. 8, § 5.)
К вопросу о влиянии ангармонизма на колебания и волны в кристалле (линейная атомная цепочка).
994. Ансельм А. И., Ланг И. Г., ФТТ, 1, 683 (1959).
Теория двухфононного рассеяния электронов проводимости в атомных кристаллах.
995. Ансельм А. И., Аскеров Б. М., ФТТ, 2, 2310 (1960). (Гл. 2, § 4.)
Термомагнитные явления в полуметаллах в сильном магнитном поле.
996. Ансельм А. И., Аскеров Б. М., ФТТ, 2, 2821 (1960).
Химический потенциал и критерий вырождения электронов проводимости в сильном магнитном поле.

997. Ансельм А. И., Аскеров Б. М., ФТТ, 3, 3668 (1961). (Гл. 2, § 4.)
Терромагнитные явления в полупроводниках в сильном магнитном поле в случае рассеяния электронов на короткодействующем потенциале.
998. Ансельм А. И., Аскеров Б. М., ФТТ, 4, 1573 (1962).
Продольные терромагнитные эффекты в полупроводниках в сильном продольном магнитном поле.
999. Antonicik E., Czech. Journ. Phys., 5, 449 (1955). (Гл. 5, § 5.)
К теории температурного сдвига кривой поглощения в неполярных кристаллах.
1000. Antonicik E. (см. [4604]).
1001. Аркер Л., Тафт Е., Phys. Rev., 79, 964 (1950). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Фотоэффект с F -центров в Kl .
1002. Аркер Л., Тафт Е., Phys. Rev., 82, 814 (1951). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Распределение внешних фотоэлектронов по энергиям при фотоэффекте с F -центров в RbI .
1003. Аркер Л., Тафт Е., Дики Дж., Phys. Rev., 84, 508 (1951). (Гл. 3, § 10 и 11.)
О внешнем фотоэффекте и энергетическом спектре BaO .
1004. Аркер Л. (см. [4579]).
1005. Арпел Дж., Zs. Naturforsch., 11a, 689 (1956). (Гл. 3, § 9.)
Влияние квантования уровней в магнитном поле на граничную энергию Ферми в полупроводниках.
1006. Арпел Дж., Zs. Naturforsch., 12a, 410 (1957).
Термо-э. д. с. неполярных полупроводников.
1007. Арпел Дж., Zs. Naturforsch., 13a, 386 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Теория терромагнитных эффектов в неполярных изотропных полупроводниках.
1008. Арпел Дж., Zs. Naturforsch., 14a, 379 (1959).
Явления переноса в упругих анизотропных металлах.
1009. Арпел Дж., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 353, 361 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Теория термоэлектрических и терромагнитных эффектов в неполярных изотропных полупроводниках.
1010. Агаи Т., Proc. Phys. Soc., 84, 25 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Плазменные колебания в сильнолегированном кремнии n -типа.
1011. Агаи Т., Phys. Rev., 134, A824 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Групповые разложения в трактовке Гейтлера—Лондона задачи многих тел.
1012. Аргюес Р. Н., Адамс Е. Н., Phys. Rev., 104, 900 (1956). (Гл. 3, § 10.)
Продольное магнетосопротивление в квантовом пределе.
1013. Аргюес Р. Н., Phys. Rev., 109, 1115 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Квантовая теория гальваномагнитных эффектов.
1014. Аргюес Р. Н., Journ. Phys. Chem. Solids, 4, 19 (1958). (Гл. 3, § 10.)
Квантовая теория продольного магнетосопротивления.
1015. Аргюес Р. Н., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 124 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные эффекты в квантовом пределе.
1016. Аргюес Р. Н., Рот Л. М., Journ. Phys. Chem. Solids, 12, 89 (1959), (Гл. 3, § 10.)
Теория электропроводности в сильных магнитных полях.
1017. Аргюес Р. Н., Phys. Rev., 117, 315 (1960). (Гл. 2, § 4.)
Квантовая теория явлений переноса в магнитном поле.
1018. Аргюес Р. Н., Journ. Phys. Chem. Solids, 19, 66 (1961).
Вывод кинетического уравнения Больцмана для случая неупругих столкновений.
1019. Аргюес Р. Н. (см. [907]),

1020. Ariyama K., Mase S., *Progr. Theor. Phys.* (Kyoto), **12**, 246 (1954). (Гл. 3, § 11.)
Интерпретация электропроводности и диамагнитной восприимчивости графита.
1021. Ariyama K. (см. [4557]).
1022. Архипов Р. Г., Кечин В. В., Лихтер А. И., Поспелов Ю. А., *ЖЭТФ*, **44**, 1964 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в графите и деформация электронного спектра графита под давлением.
1023. Arthur J. B., Gibson A. F., Granville J. W., Paige E. G. S., *Phil. Mag.*, **3**, 940 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Коэффициент диффузии, подвижность и время жизни неосновных носителей заряда в германии, содержащем параллельные ряды дислокаций.
1024. Asano S., Tomishime Y., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **12**, 346, 890, 900 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Вращательные колебания решетки в сложных кристаллах. I. Колебательные моды и удельная теплоемкость. II. Колебательные моды оптических ветвей и взаимодействие с электронами проводимости. III. Частоты колебаний в кубических кристаллах.
1025. Ascarelli G., Brown F. C., *Phys. Rev. Lett.* **9**, 209 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в AgBr.
1026. Asdente M., Friedel J., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **11**, 115 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Расчет сопротивления, связанного со сферическими полостями в Si.
1027. Ashcroft N. W., *Phys. Lett.*, **4**, 202 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми в алюминии.
1028. Ashkin M., *Phys. Rev.*, **136**, A821 (1964). (Гл. 8, § 5)
Влияние поверхности на частоты локальных колебаний в кристаллах, содержащих массовые дефекты.
1029. Аскеров Б. М., ФТТ, **3**, 3581 (1961). (Гл. 2, § 4.)
Термомагнитные явления в вырожденных полупроводниках и металлах в произвольном магнитном поле.
1030. Аскеров Б. М., ФТТ, **3**, 3663 (1961). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Нернста—Эттинггаузена в сильном магнитном поле при учете смешанного механизма рассеяния.
1031. Аскеров Б. М. (см. [995—998]).
1032. Асланян В. М., Волькенштейн М. В., *Оптика и спектроскопия*, **7**, 208 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Оптическая активность и межмолекулярное взаимодействие.
1033. Atkinson N. H., Hirsch P. B., *Phil. Mag.*, **3**, 213 (1958).
Теория рассеяния дислокациями на малые углы.
1034. Aub M. R., Power E. A., Zienau S., *Phil. Mag.*, **2**, 571 (1957). (Приложение 5, § 7.)
Влияние запаздывания на силу Лондона—Ван дер Ваальса.
1035. Aubrey J. E., Chambers R. G., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **3**, 128 (1957). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в висмуте.
1036. Aubrey J. E., *Phil. Mag.*, **5**, 1001 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в свинце.
1037. Aubrey J. E., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **19**, 321 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в висмуте. II.
1038. Authier A., *Acta Cryst.*, **9**, 411 (1956).
Теоретическое и экспериментальное изучение температурного множителя и затухания в цинковой обманке.

1039. Ауант Y., Dreyfus B., Beretti J., *Compt. Rend.*, **244**, 1898 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Удельная теплоемкость трехмерной решетки осцилляторов.
1040. Азбель М. Я., *ДАН СССР*, **99**, 519 (1954).
Проводимость пленок в продольном магнитном поле.
1041. Азбель М. Я., Канер Е. А., *ЖЭТФ*, **29**, 876 (1955). (Гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект при произвольном интеграле столкновений.
1042. Азбель М. Я., Канер Е. А., *ЖЭТФ*, **30**, 811 (1956). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонанса в металлах.
1043. Азбель М. Я., Канер Е. А., *ЖЭТФ*, **32**, 896 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонанса в металлах.
1044. Азбель М. Я., Каганов М. И., Лифшиц И. М., *ЖЭТФ*, **32**, 1188 (1957).
Теплопроводность и термоэлектрические явления в металлах в магнитном поле.
1045. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **34**, 754 (1958).
К вопросу о восстановлении формы поверхности Ферми в металлах.
1046. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **34**, 766 (1958). (Гл. 5, § 1.)
К теории поверхностного импеданса металлов при аномальном скин-эффекте.
1047. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **34**, 969 (1958). (Гл. 5, § 1.)
Квантовая теория высокочастотной проводимости металлов.
1048. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **34**, 1158 (1959). (Гл. 5, § 1.)
Квантовые осцилляции высокочастотного поверхностного импеданса.
1049. Азбель М. Я., Канер Е. А., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **6**, 113 (1958). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в металлах.
1050. Азбель М. Я., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **7**, 105 (1958). (Гл. 5, § 1.)
Квантовая теория высокочастотного поверхностного импеданса металла.
1051. Азбель М. Я., Канер Е. А., *ЖЭТФ*, **39**, 80 (1960). (Гл. 3, § 8.)
К вопросу об экспериментальном изучении циклотронного резонанса в металлах.
1052. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **39**, 400 (1960).
Новый резонансный эффект в металлах при высоких частотах.
1053. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **39**, 878 (1960).
Квантовые осцилляции термодинамических величин при произвольной поверхности Ферми.
1054. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **39**, 1138 (1960).
К вопросу о возможности определения в металлах корреляционной функции для ферми-жидкости.
1055. Азбель М. Я., Бегнашвили Г. А., *ЖЭТФ*, **42**, 640 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Ширина линии циклотронного резонанса в полуметаллах и определение корреляционной функции для висмута.
1056. Азбель М. Я., Гуржи Р. Н., *ЖЭТФ*, **42**, 1362 (1962). (Гл. 5, § 1.)
Электропроводность тонких образцов и возможности определения длины свободного пробега электронов в металлах.
1057. Азбель М. Я., *ФТТ*, **4**, 568 (1962).
Комбинированный резонанс в металлах.
1058. Азбель М. Я., *ЖЭТФ*, **44**, 980 (1963).
Квантование для квазичастиц с периодическим законом дисперсии в сильном магнитном поле.
1059. Азбель М. Я. (см. [2432, 2749, 2786, 3286]).
1060. Azuma M., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **18**, 194 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Влияние решетки на внутреннюю диэлектрическую проницаемость.

1061. Babiskin J., Phys. Rev., 107, 981 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Осцилляции гальваномагнитных свойств монокристаллов висмута в продольных магнитных полях.
1062. Babiskin J., Siebenmann P. G., Phys. Rev., 107, 1245 (1957). (Гл. 3, § 10.)
Новый тип осцилляций магнетосопротивления в металлах.
1063. Babiskin J. (см. [4462]).
1064. Bacon G. E., Pease R. S., Proc. Roy. Soc., A220, 397 (1953). (Гл. 8, § 1 и 5.)
Исследование дигидрофосфата калия с помощью фурье-синтеза результатов по дифракции нейтронов.
1065. Bacon G. E., Lonsdale K., Rep. Progr. Phys., 16, 1 (1953). (Гл. 8, § 1.)
Дифракция нейтронов.
1066. Bacon G. E., Journ. Chim. Phys., 51, D65 (1954). (Гл. 8, § 1.)
Изучение структуры молекул с помощью дифракции нейтронов.
1067. Bacon G. E., Pease R. S., Proc. Roy. Soc., A230, 359 (1955). (Гл. 8, § 1 и 5.)
Изучение сегнетоэлектрического перехода в дигидрофосфате калия.
1068. Bacon G. E. (см. [3857]).
1069. Bacon M. D., Dean P., Martin J. L., Proc. Phys. Soc., 80, 174 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Локальные моды в двухкомпонентных цепочках.
1070. Bacon M. D. (см. [1721]).
1071. Bade W. L., Journ. Chem. Phys., 27, 1280 (1957). (Приложение 5, § 7.)
Расчет дисперсионных сил с помощью модели Друде. I. Общая теория.
1072. Bade W. L., Kirkwood J. G., Journ. Chem. Phys., 27, 1284 (1957). (Приложение 5, § 7.)
Расчет дисперсионных сил с помощью модели Друде. II. Линейная решетка.
1073. Bade W. L., Journ. Chem. Phys., 28, 282 (1958). (Приложение 5, § 7.)
Расчет дисперсионных сил с помощью модели Друде. III. Вклад величин четвертого порядка.
1074. Baer W. S., Dexter R. N., Phys. Rev., 135, A1388 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Электронный циклотронный резонанс в CdS.
1075. Bagguley D. M. S., Powell J. A., Taylor D. J., Proc. Phys. Soc., A70, 759 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в широком температурном диапазоне.
1076. Bagguley D. M. S., Owen J., Rep. Progr. Phys., 20, 304 (1957).
Микроволновые свойства твердых тел.
1077. Bagguley D. M. S., Nature, 185, 586 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Электрон-фононные взаимодействия.
1078. Bagguley D. M. S., Stradling R. A., Whiting J. S., Proc. Roy. Soc., A262, 340, 365 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в широком температурном диапазоне. I. Германий. II. Кремний.
1079. Bagguley D. M. S., Stradling R. A., Proc. Phys. Soc., 78, 1078 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс на длине волны 4 мм.
1080. Bagguley D. M. S., Robinson M. L. A., Stradling R. A., Phys. Lett., 6, 143 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в *p*-InSb на миллиметровых волнах.
1081. Bailin M., Phys. Rev., 112, 1587, (1957).
Явления переноса в металлах: влияние неравновесных фононов.

1082. Bailin M., Phys. Rev., 117, 974 (1960).
Обменные и корреляционные эффекты при электрон-фононном рассеянии электронов на фонах в обычных металлах.
1083. Bak T. A., Goche M., Benin F., Mol. Phys., 2, 181 (1959). (Гл. 8, § 5.)
О движении частицы, взаимодействующей с колебаниями решетки.
1084. Baker G. A., Jr., Hill B. J., McKee R. J., Phys. Rev., 135, A922 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Изучение ряда теорий возмущений для основного состояния системы многих фермионов.
1085. Balazs N. L., Phys. Rev., 105, 896 (1957).
Тепловые флуктуации в проводниках.
1086. Balazs N. L., Phys. Rev., 134, A841 (1964).
Теория атома по Томасу—Ферми как решение цепочки уравнений для матрицы плотности.
1087. Balazs N. L., Mould R. A., Phys. Rev., 135, A1560 (1964).
Теория возбужденных атомных состояний по методу Томаса—Ферми.
1088. Balchan A. S., Drickamer H. G., Journ. Chem. Phys., 34, 1948 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Влияние высокого давления на сопротивление иода и селена.
1089. Balchan A. S. (см. [4533]).
1090. Балчанова Л. А., Бредов М. М., Котов Б. А., ФТТ, 4, 86 (1962).
Плазменные спектры в In и InSb.
1091. Balcombe R. J., Proc. Roy. Soc., A275, 113 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление алюминия.
1092. Baldock G. R., Phil. Mag., 1, 789 (1956) (Гл. 8, § 6.)
Колебания решетки и удельная теплоемкость графита.
1093. Balkanski M., Journ. Phys. Chem. Solids, 6, 401 (1958).
О механизме переноса энергии.
1094. Balkanski M., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 179 (1959).
Перенос энергии в полупроводниках.
1095. Balkanski M., Nazarewicz W., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 437 (1964). (Гл. 8, § 6.)
Локальные колебания, обусловленные атомами бора и лития в решетке кремния.
1096. Balkanski M. (см. [3603]).
1097. Ballantine L. E., Heine V., Phil. Mag., 9, 617 (1964).
К теории жидких металлов.
1098. Ballinger R. A., March N. H., Proc. Phys. Soc., A67, 378 (1954). (Гл. 10, § 1.)
Обобщенный метод Томаса—Ферми.
1099. Baltensperger W., Phil. Mag., 44, 1355 (1953).
О проводимости в примесной зоне.
1100. Band W., Amer. Journ. Phys., 27, 397, 471 (1959).
Новый взгляд на теорию электрон-фононного резонанса.
1101. Baraff G. A., Phys. Rev., 133, A26 (1964).
Приближение максимальной анизотропии в задаче о функции распределения электронов: приложение к явлениям переноса в полупроводниках в сильных полях.
1102. Baraff G. A., Phys. Rev., 135, A528 (1964).
Форма спектральных линий и длина пробега для горячих электронов при конечном поглощении.

1103. Baraff G. A., Phys. Rev., 137, A842 (1965). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Энергетические уровни в зоне проводимости висмута в магнитном поле.
1104. Барамидзе Г. А., Гургенишвили Г. Е., Хуцишвили Г. Р., ФТТ, 4, 2958 (1962). (Гл. 3, § 8.)
К квантовой теории циклотронного резонанса в вырожденной зоне.
1105. Баранский П. И., Курило П. М., ФТТ, 6, 54 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Исследование свойств симметрии изоэнергетических поверхностей в л-германии посредством холловских измерений.
1106. Баранский П. И., Винецкий Р. М., Курило П. М., ФТТ, 6, 1048 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Анизотропия коэффициента Холла в р-германии.
1107. Barber S. W., Marfin B., Journ Phys. Chem. Solids, 9, 198 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Теплоемкость изотропных твердых тел при наличии дисперсии скорости.
1108. Barcus L. C., Perlmutter A., Callaway J., Phys. Rev., 111, 167 (1958) (Гл. 3, § 11.)
Эффективная масса электронов в арсениде галлия.
1109. Bardeen J., Phys. Rev., 71, 717 (1947).
Поверхностные состояния и выпрямление на контакте металл—полупроводник.
1110. Bardeen J., Shockley W., Phys. Rev., 80, 69 (1950).
Рассеяние электронов в кристаллах в присутствии больших электрических полей.
1111. Bardeen J., Shockley W., Phys. Rev., 80, 72 (1950). (Гл. 2, § 3.)
Потенциалы деформации и подвижности в неполярных кристаллах.
1112. Bardeen J., Canad. Journ. Phys., 34, 1171 (1956).
Взаимодействие между электронами и колебаниями решетки.
1113. Bardeen J., Coover R. E., Morrison S. R., Schrieffer J. R., Sun R., Phys. Rev., 104, 47 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Поверхностная проводимость и эффект поля в германии.
1114. Bardeen J., Semiconductor Phosphors 1958, p. 81. (Гл. 3, § 11.)
Методы исследования распределения поверхностных состояний в Ge и Si.
1115. Bardeen J., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 2, 13 (1959).
Тенденции в исследовании полупроводников.
1116. Bardeen J. (см. [3534]).
1117. Barker A. S., Jr., Phys. Rev., 135, A742 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Инфракрасные колебания решетки в вольфрамите и молибдате кальция.
1118. Barker A. S., Jr., Hopfield J. J., Phys. Rev., 135, A1732 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Теория дисперсии инфракрасного излучения в BaTiO_3 , SrTiO_3 и KTaO_3 , основанная на представлении о связанных фотон-фононных модах.
1119. Barker A. S., Jr., Phys. Rev., 136, A1290 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Изучение поперечных и продольных оптических мод в MgF_2 и ZnF_2 .
1120. Barnes G. A., Vanbury P. C., Proc. Phys. Soc., 71, 1020 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства чистых поверхностей германия.
1121. Baroody E. M., Phys. Rev., 101, 1679 (1956).
Возбуждение электронов в металлах первичными электронами.

1122. Barrett E. B., Whitman R. F., Tetenbaum S. J., Phys. Rev., **135**, A369 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Нелинейное взаимодействие электромагнитной волны с плазменным слоем в статическом магнитном поле.
1123. Barrett J. H., Phys. Rev., **86**, 118 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Диэлектрическая проницаемость кристаллов типа перовскита.
1124. Baggie R., Proc. Phys. Soc., **B69**, 553 (1956).
Электропроводность твердых тел со сферически симметричной зонной структурой.
1125. Baggie R., Phys. Rev., **105**, 1581 (1956).
Влияние обмена и корреляции на явления переноса электронов в металлах.
1126. Baggie R., Proc. Phys. Soc., **B70**, 1008 (1957). (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление в сильных магнитных полях.
1127. Baggie R. (см. [2564]).
1128. Baggon T. H. K., App. Phys., **1**, 77 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Параметры Грюнайзена для уравнения состояния в твердых телах.
1129. Baggon T. H. K., Morrison J. A., Phys. Rev., **115**, 1439 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Свойства щелочногалондных кристаллов при низких температурах.
1130. Baggon T. H. K., Morrison J. A., Proc. Roy. Soc., **A256**, 427 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Термические свойства щелочногалондных кристаллов. III. Инверсия теплоемкости.
1131. Baggon T. H. K., Phys. Rev., **123**, 1995 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Длинноволновые оптические колебания в простых ионных кристаллах.
1132. Baggon T. H. K., Klein M. L., Phys. Rev., **127**, 1997 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Тепловые и упругие свойства кристаллов при низких температурах.
1133. Baggon T. H. K., Klein M. L., Proc. Phys. Soc., **82**, 161 (1963). (Гл. 8, § 5.)
О зависимости распределения колебательных спектров простых решеток от деформации.
1134. Басс Ф. Г., Цидильковский И. М., ЖЭТФ, **31**, 672 (1956). (Гл. 2, § 4.)
Теория изотермических гальвано- и термомагнитных явлений в полупроводниках.
1135. Басс Ф. Г., Каганов М. И., ЖЭТФ, **32**, 1233 (1957). (Гл. 2, § 4.)
К вопросу о насыщении «постоянной» Холла в полупроводниках в сильных магнитных полях.
1136. Басс Ф. Г., Каганов М. И., Слезов В. В., Физ. метал. и металловед., **5**, 406 (1957). (Гл. 2, § 4.)
К теории гальваномагнитных явлений в металлах.
1137. Bassani F., Robinson J., Goodman B., Schrieffer J. R., Phys. Rev., **127**, 1969 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Метод проектированного волнового поля в многоэлектронной задаче твердых тел.
1138. Bassani F., Kpox R. S., Fowler W. B., Phys. Rev., **137**, A1217 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и электронные свойства AgCl и AgBr.
1139. Bassani F. (см. [1426, 4120]).
1140. Bate R. T., Willardson R. K., Veer A. C., Journ. Phys. Chem. Solids, **9**, 119 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Поперечное магнетосопротивление и эффект Холла в n -InSb.

1141. Batterman В. W., Phys. Rev. Lett., 2, 47 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Исследование распределения электронов в железе и меди рентгеновскими методами.
1142. Batterman В. W., Phys. Rev., 115, 81 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Измерение фактора атомного рассеяния в железе рентгеновскими методами.
1143. Batterman R. W., Chipman D. R., De Marco J. J., Phys. Rev., 122, 68 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Абсолютное измерение факторов атомного рассеяния в железе, меди и алюминии.
1144. Batterman В. W., Phys. Rev., 127, 686 (1962). (Гл. 8, § 1.)
Влияние тепловых колебаний на дифракцию от идеальных кристаллов. II. Брэгговский случай отражения.
1145. Batterman В. W., Chipman D. R., Phys. Rev., 127, 690 (1962). (Гл. 8, § 1.)
Амплитуды колебаний в Ge и Si.
1146. Batterman В. W., Phys. Rev., 133, A759 (1964).
Влияние динамической дифракции на рассеяние рентгеновских лучей.
1147. Batterman В. W., Phys. Rev., 134, A1354 (1964).
Новое определение температурной зависимости аномального происхождения рентгеновских лучей в германии.
1148. Batterman В. W., Coie H., Rev. Mod. Phys., 36 681 (1964). (Гл. 6, § 3.)
Динамическая дифракция рентгеновских лучей на идеальных кристаллах.
1149. Bauer E., Wu T. Y., Phys. Rev., 104, 914 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение линейной цепочки.
1150. Bauer E., Journ. Chem. Phys., 26, 1440 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Связь оптических и акустических мод колебаний в кристаллах.
1151. Baum G., Phys. Rev., 135, A1691 (1964).
Прямой расчет электронных свойств металлов по данным о рассеянии нейтронов.
1152. Базаров И. П., ДАН СССР, 140, 85 (1961).
К теории кристалла.
1153. Бажулин П. А., Мясникова Т. П., Раков А. В., ФТТ, 5, 1783 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Исследование колебательных спектров некоторых сегнетоэлектриков методом комбинационного рассеяния света.
1154. Beal M. T., Fridel J., Phys. Rev., 135, A466 (1964).
Соотношение между локальным порядком и интерференционными явлениями в электрическом сопротивлении мегаллических сплавов.
1155. Beattie A. R., Landsberg P. T., Proc. Roy. Soc., A249, 16 (1959).
Эффект Оже в полупроводниках.
1156. Beattie A. R., Landsberg P. T., Proc. Roy. Soc., A258, 486 (1960).
Одномерные функции перекрытия и их приложение к расчету Оже-рекомбинации в полупроводниках.
1157. Beattie A. R. (см. [3161]).
1158. Beattie J. R., Physica, 23, 898 (1957). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект и инфракрасные свойства серебра и алюминия.
1159. Beck A., Jan A. P., Pearson W. B., Phil. Mag., 8, 351 (1963).
Экспериментальное определение поверхностей Ферми; распространение на случай металлических соединений и сплавов.
1160. Becker J. H., Hosler W. R., Phys. Rev., 137, A1872 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Многозонная проводимость в рутиле (TiO_2) n -типа.

1161. Becker W. M., Ramdas A. K., Fan H. Y., Journ. Appl. Phys., **32** (Suppl.), 2094 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура антимолида галлия.
1162. Veeby J. L., Edwards S. F., Proc. Roy. Soc., **A274**, 395 (1963).
Электронная структура жидких диэлектриков.
1163. Veeby J. L., Proc. Roy. Soc., **A279**, 82 (1964).
Электронная структура неупорядоченных систем.
1164. Veeby J. L., Phys. Rev., **135**, A130 (1964).
Электронная структура сплавов.
1165. Beer A. C., Armstrong J. A., Greenberg I. N., Phys. Rev., **107**, 1506 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Вычисления интегралов, встречающихся в теории явлений переноса для смешанного рассеяния; приложение к гальваномангнитному эффекту.
1166. Beer A. C., Willardson R. K., Phys. Rev., **110**, 1386 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла и поперечное магнетосопротивление в случае гофрированных изоэнергетических поверхностей и смешанного рассеяния.
1167. Beer A. C., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 507 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Тонкая структура постоянной Холла.
1168. Beer A. C. (см. [1140]).
1169. Veggie G. H., Borg M., Proc. Roy. Soc., **A188**, 179 (1947). (Гл. 8, § 1.)
Тепловое рассеяние рентгеновских лучей кристаллами, динамические основы.
1170. Veggie G. H., Proc. Roy. Soc., **A188**, 189 (1947). (Гл. 8, § 1.)
Тепловое рассеяние рентгеновских лучей кристаллами. II. Тепловое рассеяние в гранецентрированной кубической и плотноупакованной гексагональной решетке.
1171. Бегияшвили Г. А., Физ. мет. и металловед., **11**, 954 (1961). (Гл. 3, § 8.)
К теории циклотронного резонанса.
1172. Бегияшвили Г. А. (см. [1055]).
1173. Bell R. L., Hogarth C. A., Journ. Electron. Contr., **3**, 455 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Анизотропные длины диффузии в кристаллах германия и кремния, содержащих параллельные ряды красных дислокаций.
1174. Bellemans A., de Leeper M., Phys. Rev. Lett., **6**, 603 (1961). (Гл. 10, § 4.)
Энергия основного состояния электронного газа в решетке положительных точечных зарядов.
1175. Bellemans A. (см. [1745]).
1176. Bellman R., Phys. Rev., **101**, 19 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Динамика неупорядоченной линейной цепочки.
1177. Bemski G., Proc. Inst. Rad. Eng., **46**, 990 (1958).
Рекомбинация в полупроводниках.
1178. Bemski G., Szymanski B., Journ. Phys. Chem. Solids, **17**, 335 (1960). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Наблюдения осцилляций магнетосопротивления InAs на микроволновых частотах.
1179. Bepedek G. V., Paul W., Brooks H., Phys. Rev., **100**, 1129 (1955). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Проводимость, эффект Холла и магнетосопротивление в *n*-германии и их зависимость от давления.
1180. Bepedek G. V., Phys. Rev., **114**, 467 (1959). (Гл. 10, § 4.)
Вывод объемной зависимости энергии связи твердых тел из измерений по сжатию ударной волной.

1181. Веннеман К. Н., *Phys. Rev.*, **133**, A1045 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Метод T -матрицы в задаче о распределении электронов в кристаллах.
1182. Bennett A. I., Hunter L. P., *Phys. Rev.*, **81**, 152 (1951).
Исследование импульсным методом обратной ветви вольтамперной характеристики германиевых точечных контактов.
1183. Bennet H. S., Stern E. A., *Phys. Rev.*, **137**, A448 (1965). (Гл. 3, § 8.)
Эффект Фарадея в твердых телах.
1184. Benoit à la Guillaume C., Chernogoga J., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 383 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Примесная фотопроводимость с испусканием фононов в германии.
1185. Benoit à la Guillaume C., Tric C., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 837 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Оптическое изучение полупроводников типа III—V с целью конструирования лазеров.
1186. Benson G. C., McIntosh R., *Canad. Journ. Chem.*, **33**, 1677 (1956). (Гл. 10, § 4; гл. 3, § 11.)
Некоторые расчеты поверхностей энергии окиси магния.
1187. Benson G. C., Schreiber H. P., Paterson D., *Canad. Journ. Phys.*, **34**, 265 (1956). (Гл. 10, § 4; гл. 3, § 11.)
Проверка модели Вервея для решеточной структуры свободной поверхности щелочногалогидных кристаллов.
1188. Benson G. C., Claxton T. A., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 367 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Оценка поверхностей энергии кристаллов инертных газов.
1189. Benthem C. W., *Appl. Sci. Res.*, **B7**, 275 (1958). (Гл. 5, § 5.)
О возможном влиянии взаимодействия электронов на отражательную способность металлов.
1190. Berg W. T., Morrison J. A., *Proc. Roy. Soc.*, **A242**, 467, 478 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Тепловые свойства щелочногалогидных кристаллов. I. Теплоемкость хлористого калия, бромистого калия, иодистого калия и иодистого натрия между 2,8 и 270°K. II. Анализ экспериментальных результатов.
1191. Berghuis J., Haanappel J., Potters M., Loopstra B. O., MacGillavry C. H., Veenendaal A. L., *Acta Cryst.*, **8**, 478 (1955). (Гл. 6, § 2.)
Новые расчеты факторов атомного рассеяния.
1192. Berglund C. N., Spicer W. E., *Phys. Rev.*, **136**, A1030 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Исследование меди и серебра с помощью внешнего фотоэффекта. Теория.
1193. Berglund C. N., Spicer W. E., *Phys. Rev.*, **136**, A1044 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Исследование меди и серебра с помощью внешнего фотоэффекта. Эксперимент.
1194. Berglund C. N. (см. [4437]).
1195. Berlincourt T. G., *Phys. Rev.*, **94**, 1172 (1954). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза—ван Альфена в кадмии.
1196. Berlincourt T. G., Steele M. C., *Phys. Rev.*, **95**, 1421 (1954). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Зависящие от температуры параметры де Гааза—ван Альфена в цинке.
1197. Berlincourt T. G., Steele M. C., *Phys. Rev.*, **98**, 956 (1955). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции эффекта Холла, магнетосопротивления и магнитной восприимчивости в монокристалле графита.

1198. Berlincourt T. G., Phys. Rev., **99**, 1716 (1955). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза—ван Альфена в мышьяке.
1199. Berlincourt T. G., Phys. Rev., **112**, 381 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 10 и 11.)
Эффект Холла, магнетосопротивление и размерные эффекты в меди.
1200. Berlincourt T. G. (см. [3802, 4635]).
1201. Bergman R., Adv. Phys., **2**, 103 (1953).
Теплопроводность диэлектрических твердых тел при низких температурах.
1202. Bergman R., Foster E. L., Ziman J. M., Proc. Roy. Soc., **A237**, 344 (1956).
Теплопроводность диэлектрических кристаллов; влияние изотопов.
1203. Bergman R., Nettley P. T., Sheard F. W., Spencer A. N., Stevenson R. W. H., Ziman J. M., Proc. Roy. Soc., **A253**, 403 (1959).
Влияние точечных дефектов на решеточную теплопроводность твердых тел.
1204. Bernard W., Roth H., Straub W. D., Phys. Rev., **132**, 33 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитное исследование вырожденного германия, легированного галлием; непараболические поверхности энергии с разной гофрировкой.
1205. Bernard W., Roth H., Straub W. D., Mulhern J. E., Jr., Phys. Rev., **135**, A1386 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции де Гааза—ван Альфена магнетосопротивления сильно легированного германия.
1206. Bernstein I. B., Phys. Rev., **109**, 10 (1958).
Волны в плазме в магнитном поле.
1207. Berz F., Proc. Phys. Soc., **B69**, 939 (1956) (Гл. 11, § 7.)
О теории плазменных волн.
1208. Berz F., Proc. Phys. Soc., **71**, 275 (1958).
К теории поверхностной рекомбинации в полупроводниках при большой разности потенциалов между поверхностью и объемом.
1209. Bess L., Phys. Rev., **105**, 1469 (1957).
Возможный механизм безызлучательной рекомбинации в полупроводниках.
1210. Best P. E., Proc. Phys. Soc., **79**, 133 (1962). (Гл. 5, § 3.)
Характеристические спектры электронных энергетических потерь в некоторых щелочногалогидных кристаллах.
1211. Best P. E., Proc. Phys. Soc., **80**, 1308 (1962). (Гл. 5, § 3.)
Характеристические энергетические потери в соединениях.
1212. Best P. E. (см. [4118]).
1213. Betts D. D., Bhatia A. B., Wуman M., Phys. Rev., **104**, 37 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Метод Хаустона и его применение к вычислению характеристических температур кубических кристаллов.
1214. Betts D. D., Bhatia A. B., Wуman M., Horton G. K., Phys. Rev., **104**, 43 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Характеристические температуры Дебая для некоторых некубических кристаллов.
1215. Безуглый П. А., Галкин А. А., ЖЭТФ, **33**, 1076 (1957). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в олове на частоте 9300 Мгц.
1216. Безуглый П. А., Галкин А. А., ЖЭТФ, **34**, 236 (1958). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в свинце на частоте 8900 Мгц.

1217. Безуглый П. А., Галкин А. А., ЖЭТФ, 37, 1480 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в индии на частоте 9300 Мгц.
1218. Безуглый П. А., Галкин А. А., Пушкин А. И., ЖЭТФ, 44, 71 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Магнетоакустические осцилляции и поверхность Ферми в алюминии.
1219. Bhatia M. S., Speisman G., Phys. Rev., 136, A362 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Корреляционная энергия электронного газа при металлических плотностях.
1220. Biemenstock A., Phil. Mag., 9, 755 (1964).
Расчет теплового расширения германия.
1221. Bijvoet J. M., Lonsdale K., Phil. Mag., 44, 204 (1953). (Гл. 3, § 11.)
Ионное состояние LiH.
1222. Bingen R., Bull. Acad. Roy. Belg. Classe Sci., 41, 741 (1955). (Гл. 8, § 5.)
О распространении акустических волн в кристаллах.
1223. Binnie W. P., Phys. Rev., 103, 579 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Вычисление средней дебаевской температуры кубических кристаллов.
1224. Biondi M., Raupе J. A., Phys. Rev., 115, 1522 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура сплавов благородных металлов: оптическое поглощение α -бронз при 4,2° К.
1225. Biot M. A., Phys. Rev., 105, 1129 (1957).
Общие теоремы об эквивалентности групповой скорости и скорости переноса энергии.
1226. Бир Г. Л., Пикус Г. Е., ФТТ, 2, 2287 (1960)
Теория деформационного потенциала для полупроводников со сложной зонной структурой.
1227. Бир Г. Л., Пикус Г. Е., ФТТ, 3, 3050 (1961) (Гл. 3, § 11.)
Влияние деформации на энергетический спектр и электрические свойства полупроводников типа InSb.
1228. Бир Г. Л., Нормантас Э., Пикус Г. Е., ФТТ, 4, 1180 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные эффекты в полупроводниках с вырожденными зонами.
1229. Бир Г. Л., Пикус Г. Е., ФТТ, 4, 2243 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и эффекты пьезосопротивления в PbTe и PbSe.
1230. Бир Г. Л. (см. [3916, 3917]).
1231. Birch J. A., Kemp W. R. G., Klemens P. G., Proc. Phys. Soc., 71, 843 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Решеточная теплопроводность сплава золота с платиной.
1232. Bigeneau R. J., Cordes J., Dolling G., Woods A. D. B., Phys. Rev., 136, A1359 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные колебания в никеле.
1233. Birman J. L., Phys. Rev., 114, 1490 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Некоторые правила отбора для переходов зона — зона в структуре вюрцита.
1234. Birman J. L., Phys. Rev., 121, 144 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура центров ZnS.
1235. Birman J. L., Phys. Rev., 127, 1093 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Правила отбора, вытекающие из свойств пространственных групп: алмаз и цинковая обманка.
1236. Bjork R. L., Phys. Rev., 105, 456 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Локальные моды колебаний, обусловленные примесями в двухатомной цепочке.

1237. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **A64**, 681 (1951).
О величинах θ в сопротивлении металлов.
1238. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **B64**, 625 (1951).
Дифракция на изогнутом кристалле.
1239. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **B64**, 631 (1951).
Дифракция на искривленной линейной решетке.
1240. В л а с к т а п М. Phil. Mag., **42**, 1441 (1951). (Гл. 8, § 5.)
О вычислении характеристических температур из упругих постоянных.
1241. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **A65**, 394 (1952). (Гл. 8, § 5.)
О предельных частотах колебаний ионной решетки.
1242. В л а с к т а п М., в книге «Handbuch der Physik», Bd. 7—1, Berlin, 1955. (Гл. 8, § 5.)
Теплоемкость твердых тел.
1243. В л а с к т а п М., Acta Cryst., **9**, 734 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Замечание к теории Дебая—Валлера.
1244. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **B70**, 827 (1957). (Гл. 8, § 5.)
О тепловом расширении твердых тел.
1245. В л а с к т а п М., Phil. Mag., **3**, 831 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Об отрицательных коэффициентах объемного расширения.
1246. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **74**, 17 (1959). (Гл. 8, § 5.)
О решеточной теории расширения.
1247. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **84**, 371 (1964).
О соотношении между приближением конечных деформаций и решеточной теорией теплового расширения.
1248. В л а с к т а п М. (см. [4388]).
1249. В л а с к т а п М., Weisbert L. R., Nature, **192**, 155 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Модель энергетических уровней в высокоомном арсениде галлия.
1250. В л а с к т а п М., Phys. Rev., **99**, 1708 (1955); **100**, 666 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Влияние точечных дефектов на электрические свойства меди.
I. Проводимость. II. Термо-э. д. с.
1251. В л а с к т а п М., Phys. Rev., **99**, 1735 (1955).
Влияние обмена и корреляции на явления переноса электронов в металлах.
1252. В л а с к т а п М., Phys. Rev., **105**, 1118 (1957). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Затухание ультразвука в германии и кремнии.
1253. В л а с к т а п М., Phys. Rev., **105**, 1203 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Холловская и дрейфовая подвижности; их отношение и температурная зависимость в полупроводниках.
1254. В л а с к т а п М., Phys. Rev., **108**, 285 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Остаточное сопротивление медных и серебряных сплавов; зависимость от положения в периодической таблице.
1255. В л а с к т а п М., Phys. Rev., **108**, 1204 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Остаточное сопротивление золотых сплавов; зависимость от положения в периодической таблице.
1256. В л а с к т а п М., Kropf R. H., Phys. Rev., **118**, 480 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Термо-э. д. с. разбавленных медных сплавов.
1257. В л а с к т а п М., Proc. Phys. Soc., **83**, 1065 (1964).
Термо-э. д. с. металлов при нормальных температурах—ответ на вопрос.
1258. В л а с к т а п М. (см. [1463]).
1259. В л а с к т а п М., Jour. Phys. Chem. Solids, **13**, 204 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Об изотопических эффектах в сегнетоэлектрических свойствах кристаллов с короткими водородными связями.

1260. Bloch C., Messiah A., *Journ. Phys. Rad.*, **16**, 785 (1955).
Пределы поляризации атомной системы, находящейся в радиочастотном электрическом поле.
1261. Bloch C., de Dominicis C., *Nucl. Phys.*, **7**, 459 (1958); **10**, 181 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Разложение для термодинамического потенциала квантовой системы многих частиц.
1262. Blount E. I., Callaway J., Cohen M., Dumke W., Phillips J., *Phys. Rev.*, **101**, 563 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение антимонида индия.
1263. Blount E. I., *Phys. Rev.*, **114**, 418 (1959). (Гл. 3, § 9.)
Поглощение ультразвука электронами в металлах.
1264. Blount E. I., *Phys. Rev.*, **116**, 1365 (1959).
Множители, связанные с принципом Паули в теории явлений переноса.
1265. Blount E. I., *Phys. Rev. Lett.*, **4**, 114 (1960). (Гл. 3, § 10.)
Прямое наблюдение открытых магнитных орбит.
1266. Blount E. I., *Phys. Rev.*, **126**, 1636 (1962).
Блоховские электроны в магнитном поле.
1267. Blount E. I., *Solid State Phys.*, **13**, 306 (1962).
Формализм зонной теории.
1268. Blount E. I. (см. [911, 1600]).
1269. Blue M. D., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **11**, 31 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Постоянные Холла разбавленных медных сплавов.
1270. Blue M. D., *Phys. Rev.*, **134**, A226 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое поглощение в HgTe и HgCdTe.
1271. Blume M., Freeman A. J., Watson R. E., *Journ. Chem. Phys.*, **37**, 1245 (1962).
Нейтронные магнитные формфакторы и рентгеновские атомные факторы редкоземельных ионов.
1272. Boardman A. D., March N. H., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 1435 (1964).
Теория удельных теплоемкостей разбавленных сплавов.
1273. Вассага N., *Compt. Rend.*, **251**, 2505 (1960). (Гл. 8, § 6.)
Силовое поле кристаллической среды и матрицы Фурье щелочногаллоидных металлов.
1274. Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В., *ДАН СССР*, **126**, 53 (1959).
Запаздывающие и опережающие функции Грина в статистической физике.
1275. Богомолов В. Н., Жуге В. П., *ФТТ*, **5**, 3285 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Анизотропия эффекта Холла в монокристаллическом частично восстановленном рутиле (TiO_2).
1276. Богомолов Ю. В., *ФТТ*, **2**, 297 (1960).
Эффективные поля в кристаллах.
1277. Богородицкий Н. П., Митюрева И. А., Фридберг И. Д., *ФТТ*, **4**, 2393 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Влияние ковалентной связи в кристалле двуокиси титана на величину диэлектрической проницаемости.
1278. Богородицкий Н. П., Фридберг И. Д., *ФТТ*, **6**, 680 (1964).
К вопросу об электропроводности твердых диэлектриков.
1279. Bohm D., Gross E. P., *Phys. Rev.*, **75**, 1851, 1864 (1949). (Гл. 5, § 3; гл. 11, § 7.)
Теория плазменных колебаний. А. Причина поведения подобно́го поведению среды. Б. Возбуждение и затухание колебаний.

1280. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **80**, 903 (1950). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Экранирование взаимодействия электронов в металле.
1281. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **82**, 625 (1951). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Коллективное описание электронных взаимодействий. I. Магнитные взаимодействия.
1282. Bohm D., Phys. Rev., **84**, 836 (1951). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Приложение коллективной трактовки электронных и ионных колебаний к теориям электропроводности и сверхпроводимости.
1283. Bohm D., Pines D., Phys. Rev., **92**, 609 (1953). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Коллективное описание электронных взаимодействий. III. Кулоновские взаимодействия в вырожденном электронном газе.
1284. Bohm D., Huang K., Pines D., Phys. Rev., **107**, 71 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Роль дополнительных условий в коллективном описании электронных взаимодействий
1285. Bohm D., Carmi G., Phys. Rev., **133**, A319 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Разделение движений в системах многих тел на динамически независимые части с помощью проекций на равновесные множества в фазовом пространстве.
1286. Bohm D. (см. [1507, 3926]).
1287. Bohm H. V., The Fermi Surface, New York, 1960, p. 245. (Гл. 3, § 11.)
Некоторые измерения поверхности Ферми в серебре.
1288. Bohm H. V., Easterling V. J., Phys. Rev., **128**, 1021 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Магнетоакустические измерения в благородных металлах при 350 МГц.
1289. Bohm H. V. (см. [1906, 2766, 3640]).
1290. Бойко И. И., Рашба Е. И., ФТТ, **2**, 1224, 1874 (1960).
Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I, II.
1291. Бойко И. И., ФТТ, **3**, 1950 (1961).
Оптические свойства полупроводников с петлей экстремумов.
1292. Бойко И. И. (см. [4046]).
1293. Бойцов В. Г., ФТТ, **5**, 1822 (1963). (Гл. 8, § 6.)
Определение силовых постоянных и расчет колебательного спектра теллура.
1294. Bolton H. C., Heaton J. W., Proc. Phys. Soc., **78**, 239 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Распределение электронов в алмазе и интенсивности рентгеновских отражений.
1295. Bolton H. C., Fawcett W., Gurney I. D. C., Proc. Phys. Soc., **80**, 199 (1962). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Электрические поля в кристаллах; показатель преломления рутила.
1296. Бонч-Бруевич В. Л., ЖЭТФ, **30**, 342 (1956). (Гл. 11, § 7.)
К теории взаимодействия электронного газа с колебаниями кристаллической решетки.
1297. Бонч-Бруевич В. Л., ЖЭТФ, **31**, 254 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Статистика электронов и дырок в гомеоплярном полупроводнике при учете взаимодействия с колебаниями решетки.
1298. Бонч-Бруевич В. Л., ЖЭТФ, **32**, 1092 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Замечания к теории электронной плазмы в полупроводниках.
1299. Бонч-Бруевич В. Л., ФММ, **4**, 546, (1957). (Гл. 11, § 7.)
К теории электронной плазмы в твердом теле.
1300. Бонч-Бруевич В. Л., ЖТФ, **28**, 70 (1958). (Гл. 11, § 7.)
К теории эффекта поля.

1301. Бонч-Бруевич В. Л., ФММ, 6, 590 (1958). (Гл. 11, § 7.)
О применении метода функций Грина к многоэлектронной задаче в твердом теле.
1302. Бонч-Бруевич В. Л., ФММ, 6, 769 (1958). (Гл. 11, § 7.)
О применении группы перенормировки к кулоновской задаче в твердом теле.
1303. Бонч-Бруевич В. Л., Глазко В. Д., ДАН СССР, 124, 1015 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Об энергетическом спектре электронов в неидеальной решетке металла.
1304. Бонч-Бруевич В. Л., ДАН СССР, 124, 1233 (1959). (Гл. 11, § 7.)
О связи между константами взаимодействия электронов с фононами и с примесями в металлах.
1305. Бонч-Бруевич В. Л., ФТТ, 1, 1076 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Уточненная теория плазменной рекомбинации.
1306. Бонч-Бруевич В. Л., ФТТ, 1, 1213 (1959). (Гл. 11, § 7.)
К теории примесных зон.
1307. Бонч-Бруевич В. Л., Коган Ш. М., ФТТ, 1, 1221 (1959). (Гл. 11, § 7.)
К теории электронной плазмы в полупроводниках.
1308. Бонч-Бруевич В. Л., Гуляев Ю. В., ФТТ, 2, 465 (1960). (Гл. 11, § 7.)
К теории ударной рекомбинации в полупроводниках.
1309. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г., ФТТ, 2, 489 (1960). (Гл. 11, § 7.)
К теории электронной плазмы в магнитном поле.
1310. Бонч-Бруевич В. Л., ФТТ, 2, 1857 (1960). (Гл. 11, § 7.)
О зависимости спектра фононов от концентрации свободных носителей тока.
1311. Бонч-Бруевич В. Л., Коган Ш. М., App. Phys., 9, 125 (1960). (Гл. 11, § 7.)
К теории температурных функций Грина.
1312. Бонч-Бруевич В. Л., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 28. (Гл. 11, § 7.)
Проблемы многоэлектронной теории полупроводников.
1313. Бонч-Бруевич В. Л., ФТТ, 3, 768 (1961). (Гл. 11, § 7.)
О некоторых особенностях энергетического спектра многоэлектронной системы в полупроводнике.
1314. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г., ФТТ, 3, 3009 (1961). (Гл. 11, § 7.)
О влиянии примеси на энергетический спектр носителей тока.
1315. Бонч-Бруевич В. Л., ФТТ, 4, 298 (1962). (Гл. 5, § 5.)
К теории оптических переходов в полупроводниках.
1316. Бонч-Бруевич В. Л., ФТТ, 5, 1852 (1963).
К теории сильно легированных полупроводников.
1317. Бонч-Бруевич В. Л., Розман Р., ФТТ, 5, 2890 (1963).
К теории сильно легированных полупроводников. Межзонные переходы.
1318. Vogelius G., Canad. Jour. Phys., 34, 1336 (1956).
Феноменологические аспекты сопротивления чистых металлов.
1319. Vogpis F., Zs. Phys., 159, 1 (1960). (Гл. 5, § 5.)
К плотности электромагнитной энергии в дисперсионной среде.
1320. Борисов Н. Д., Немошкаленко В. В., Фефер А. М., ДАН СССР, 121, 264 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Структура энергетического спектра электронов в железо-хромистых сплавах.

1321. Борисов Н. Д., Немошкаленко В. В., Изв. АН СССР, **25**, 1002 (1961). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о распределении электронов по состояниям в металлах переходной группы железа.
1322. Борисов В. Т., Винтайкин Е. З., Потапов Л. П., ФТТ, **5**, 2530 (1963). (Гл. 8, § 5.)
О характеристиках спектра тепловых колебаний.
1323. Borland R. E., Proc. Roy. Soc., **A274**, 529 (1963).
Природа электронных состояний в неупорядоченных одномерных системах.
1324. Borland R. E. (см. [923]).
1325. Боровик Е. С., ЖЭТФ, **27**, 355 (1954). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла и изменение сопротивления свинца, меди и магния в магнитном поле.
1326. Боровик Е. С., Волоцкая В. Г., ЖЭТФ, **36**, 1650 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Исследование гальваномагнитных явлений в хrome при низких температурах.
1327. Boswarva I. M., Lidiard A. B., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 308. (Гл. 3, § 11.)
Фарадеевское вращение в германии.
1328. Boswarva I. M., Lidiard A. B., Proc. Roy. Soc., **A278**, 588 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Эффект Фарадея в полупроводниках. II.
1329. Boswarva I. M., Proc. Phys. Soc., **84**, 389 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Анализ спектра фарадеевского вращения в InSb в области края полосы поглощения.
1330. Bowers R., Legendy C., Rose F., Phys. Rev. Lett., **7**, 339 (1961). (Гл. 2, § 4.)
Осцилляционный гальваномагнитный эффект в металлическом натрии.
1331. Bowers R. (см. [4866]).
1332. Bowers W. A., Rosenstock H. B., Journ. Chem. Phys., **18**, 1058 (1950). (Гл. 8, § 5.)
О колебательном спектре кристаллов.
1333. Bowers W. A. (см. [4342]).
1334. Bowman J. C., Grimhansl J. A., Journ. Phys. Chem. Solids, **6**, 367 (1958). (Гл. 1, § 4; гл. 3, § 11.)
Низкотемпературная удельная теплоемкость графита.
1335. Boyle W. S., Brailsford A. D., Phys. Rev., **107**, 903 (1957). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Инфракрасное резонансное поглощение на связанных уровнях Ландау в InSb.
1336. Boyle W. S., Brailsford A. D., Galt J. K., Phys. Rev., **109**, 1396 (1958). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Диэлектрические аномалии и циклотронное поглощение в инфракрасной области; наблюдения в висмуте.
1337. Boyle W. S., Rodgers K. F., Phys. Rev. Lett., **2**, 338 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Осцилляции типа де Гааза — ван Альфена в инфракрасном пропускании висмута.
1338. Boyle W. S., Hsu F. S. L., Kunzler J. E., Phys. Rev. Lett., **4**, 278 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Спиновое расщепление уровней Ландау в висмуте, наблюдаемое в магнетотермических опытах.
1339. Boyle W. S. (см. [4812]).

1340. Bradley C. C., Faber T. E., Wilson E. G., Ziman J. M., *Phil. Mag.*, 7, 865 (1962).
Теория электрических свойств жидких металлов. II. Многовалентные металлы.
1341. Bradley C. C., *Phil. Mag.*, 8, 1535 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Спротивление и термо-э. д. с. жидких галлия и ртути при постоянном объеме.
1342. Bragg W. L., *Nature*, 164, 7 (1949).
Гигантские молекулы.
1343. Bragg W. L., *Proc. Roy. Soc.*, A262, 145 (1961).
Развитие рентгеновского анализа.
1344. Brailsford A. D., *Proc. Phys. Soc.*, A70, 275 (1957).
Энергетические уровни электронов в металлах в магнитном поле.
1345. Brailsford A. D., Overhauser A. W., *Phys. Rev. Lett.*, 3, 331 (1959).
Теория минимума сопротивления разбавленных парамагнитных сплавов.
1346. Brailsford A. D., Overhauser A. W., *Journ. Phys. Chem. Solids*, 15, 140 (1960).
Теория минимума сопротивления разбавленных парамагнитных сплавов.
1347. Brailsford A. D. (см. [1336, 2200]).
1348. Brandt G. B., Raupе J. A., *Phys. Lett.*, 3, 148 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Электронная структура металлов группы хрома, согласно эффекту де Гааза — ван Альфена в слабом поле.
1349. Brandt G. B., Raupе J. A., *Phys. Rev.*, 132, 1512 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в слабом поле в индии.
1350. Brandt G. B., Raupе J. A., *Phys. Rev.*, 132, 1945 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Исследование переходных элементов группы хрома с помощью эффекта де Гааза — ван Альфена в слабых полях.
1351. Брандт Н. Б., Рябенко Г. А., *ЖЭТФ*, 37, 389 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Исследование влияния одностороннего сжатия на квантовые осцилляции магнитной восприимчивости висмута.
1352. Брандт Н. Б., Дубровская А. Е., Кытин Г. А., *ЖЭТФ*, 37, 572 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Исследование квантованных осцилляций магнитной восприимчивости висмута при сверхнизких температурах.
1353. Брандт Н. Б., *ЖЭТФ*, 38, 1355 (1960). (Гл. 3, § 11.)
О дырочной части поверхности Ферми у висмута.
1354. Брандт Н. Б., Разумеевко М. В., *ЖЭТФ*, 38, 276 (1960). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о влиянии примесей на энергетический спектр электронов у висмута.
1355. Брандт Н. Б., Щекочихина В. В., *ЖЭТФ*, 41, 1412 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Исследование влияния примесей сурьмы на эффект де Гааза — ван Альфена у висмута.
1356. Брандт Н. Б. (см. [947]).
1357. Гапер А. А., Chen R., *Journ. Phys. Chem. Solids*, 24, 135 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Некоторые оптические свойства монокристаллов иода.

1358. Grauer P., Semiconductors and Phosphors, Brunswick, 1958, p. 63.
Энергетические проблемы, связанные с включением инородных ионов в ионных кристаллах.
1359. Grauer W., Ann. d. Phys., 20, 390 (1957).
Энергетические потери электронов средних скоростей в металлах.
1360. Braunstein R., Moore A. R., Hegman F., Phys. Rev., 109, 695 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Собственное оптическое поглощение в сплавах германия с кремнием.
1361. Braunstein R., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 280, 285 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Переходы внутри валентной зоны в арсениде галлия.
1362. Braunstein R. (см. [902]).
1363. Brillouin L., Proc. Natl. Acad. Sci. US, 41, 401 (1955).
Взаимодействие электронов с волнами.
1364. Brillouin L., Cahiers Phys., 15, 413 (1961).
Гигантские молекулы и полупроводники.
1365. Briscoe C. V., Squire C. F., Phys. Rev., 106, 1175 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные LiF при температурах от 4,2 до 300° K, определенные с помощью ультразвуковых методов.
1366. Briscoe C. V. (см. [4447]).
1367. Brockhouse B. N., Hupp D. G., Phys. Rev., 88, 542 (1952). (Гл. 8, § 1.)
Энергетическое распределение медленных нейтронов, рассеянных твердыми телами.
1368. Brockhouse B. N., Stewart A. T., Phys. Rev., 100, 756 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние нейтронов фононами в монокристалле алюминия.
1369. Brockhouse B. N., Canad. Journ. Phys., 33, 889 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние нейтронов и колебательный спектр металлического ванадия.
1370. Brockhouse B. N., Iyengar P. K., Phys. Rev., 108, 894 (1957). (Гл. 8, § 1 и 2.)
Исследование нормальных колебаний германия с помощью нейтронной спектроскопии.
1371. Brockhouse B. N., Stewart A. T., Rev. Mod. Phys., 30, 236 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Исследование нормальных колебаний алюминия с помощью нейтронной спектроскопии.
1372. Brockhouse B. N., Iyengar P. K., Phys. Rev., 111, 747 (1958). (Гл. 8, § 1 и 2.)
Исследование нормальных колебаний германия с помощью нейтронной спектроскопии.
1373. Brockhouse B. N., Phys. Rev., 111, 1273 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Полевая зависимость рассеяния нейтронов спиновыми волнами.
1374. Brockhouse B. N., Nuovo Cimento, Suppl., 9, 45 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Исследование структурной динамики воды с помощью нейтронной спектроскопии.
1375. Brockhouse B. N., Phys. Rev. Lett., 2, 256 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Колебания решетки в кремнии и германии.
1376. Brockhouse B. N., Phys. Rev. Lett., 2, 287 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Диффузионные движения в жидкостях и рассеяние нейтронов.
1377. Brockhouse B. N., Pore N. K., Phys. Rev. Lett., 3, 259 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Временные парные корреляции в жидком свинце.

1378. Brockhouse B. N., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 400 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Исследования колебаний решетки в полупроводниках с помощью нейтронной спектроскопии.
1379. Brockhouse B. N., Rao K. R., Woods A. D. V., Phys. Rev. Lett., 7, 93 (1961). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 1.)
Образ поверхности Ферми в колебаниях решетки свинца.
1380. Brockhouse B. N., Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, International Atomic Energy, Vienna, 1961, p. 113.) (Гл. 8, § 1.)
Неупругое рассеяние нейтронов в твердых телах и жидкостях.
1381. Brockhouse B. N., Arase T., Caglioti G., Rao K. R., Woods A. D. V., Phys. Rev., 128, 1099 (1962). (Гл. 8, § 1.)
Динамика кристаллов Pb. I. Дисперсионные кривые при 100° К.
1382. Brockhouse B. N. (см. [1658, 1811, 1817, 4493, 4864—4867]).
1383. Brodsky M. B., Phys. Rev., 137, A1423 (1965). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в плутонии.
1384. Brooks H., Advances in Electronics and Electron Physics, vol. 7, New York, 1955, p. 85. (Гл. 3, § 11.)
Теория электрических свойств германия и кремния.
1385. Brooks H., Nuovo Cimento, Suppl., 7, 165 (1958). (Гл. 10, § 4.)
Квантовая теория сил сцепления.
1386. Brooks H., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 531 (1959).
Стационарные состояния в полупроводниках.
1387. Brooks H. (см. [1179, 1496, 1763, 3104, 3707]).
1388. Broom R. F., Rose-Innes A. C., Proc. Phys. Soc., B69, 1269 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Импульсный метод измерения постоянной Холла при низких температурах; некоторые результаты по антимониду индия.
1389. Broom R. F., Proc. Phys. Soc., 71, 470 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление *n*-InSb при 4,2° К.
1390. Brophy J. J., Physica, 22, 156 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура алмаза.
1391. Brophy J. J., Phys. Today, 14, 40 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Органические полупроводники.
1392. Gross H., Seeger A., Journ. Phys. Chem. Solids, 4, 161 (1958); 6, 324 (1958).
Электронное теоретическое исследование дефектов в металлах. V. Общая теория влияния дефектов решетки на явления переноса в металлах. VI. Электрическое сопротивление, связанное с дивакансиями в одновалентных металлах.
1393. Gross H., Zs. Naturforsch., 14a, 560 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Электропроводность меди при специальном учете анизотропии спектра колебаний решетки.
1394. Gross H. (см. [4245]).
1395. Broudy R. M., Venables J. D., Phys. Rev., 103, 1129 (1956); 105, 1757 (1957). (Гл. 3, § 10.)
Магнетопроводимость и зонная структура полупроводников.
1396. Brout R., Prigogine I., Physica, 22, 35, 263 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Статистическая механика необратимых процессов. V. Ангармонические силы. VI. Теплопроводность кристаллов.
1397. Brout R., Physica, 22, 509 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Статистическая механика необратимых процессов. VII. Уравнение Больцмана.
1398. Brout R., Prigogine I., Physica, 22, 621 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Статистическая механика необратимых процессов. VIII. Общая теория слабо связанных систем.

1399. Вгout R., Phys. Rev., 108, 515 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Корреляционная энергия газа высокой плотности; плазменные координаты.
1400. Вгout R., Physica, 23, 953 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Классический предел квантового уравнения переноса.
1401. Вгout R., Phys. Rev., 113, 43 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Правило сумм для колебаний решетки ионных кристаллов.
1402. Вгout R., Phys. Rev. Lett., 5, 193 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Коллективные колебания и гигантские флуктуации плотности.
1403. Вгout R., Plasma. Phys.-Accelerators-Thermonucl. Res., 2, 46 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Фононы и плазмоны.
1404. Вгout R., Visscher W. M., Phys. Rev. Lett., 9, 54 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Предлагаемый эксперимент для исследования приближенно локализованных мод в кристаллах.
1405. Вгout R. (см. [1973, 4217]).
1406. Вгown E., Phys. Rev., 133, A1038 (1964).
Блоховские электроны в однородном магнитном поле.
1407. Вгown F. C., Nuovo Cimento, Suppl., 7, 600 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Подвижность электронов в галлоидах серебра.
1408. Вгown F. C., Journ. Phys. Chem. Solids, 66, 2368 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Электронные свойства и зонная структура галондов серебра.
1409. Вгown F. C. (см. [1025, 2777, 4646]).
1410. Вгown M. A. C. S., Paige E. G. S., Phys. Rev. Lett., 7, 84 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Индукцированная электрическим полем модуляция поглощения, обусловленного межзонными переходами свободных дырок в германии.
1411. Вгown R. N., Mavroides J. G., Dresselhaus M. S., Lax В., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 203. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эксперименты по межзонному магнетотражению в висмуте.
1412. Вгown R. N., Mavroides J. G., Dresselhaus M. S., Lax В., Phys. Rev. Lett., 5, 243 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Межзонное магнетотражение в висмуте. II.
1413. Вгown R. N., Mavroides J. G., Lax В., Phys. Rev., 129, 2055 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Магнетотражение в Bi.
1414. Вгoyles A. A., Phys. Rev., 105, 347 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Расчет полей, действующих на ионы в плазме, по методу коллективных координат.
1415. Вгuesкнер К. А., Levinson С. А., Mahmoud Н. М., Phys. Rev., 95, 217 (1954). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Двухчастичные силы и ядерное насыщение. I. Центральные силы.
1416. Вгuesкнер К. А., Phys. Rev., 96, 508 (1954). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Ядерное насыщение и двухчастичные силы. II. Тензорные силы.
1417. Вгuesкнер К. А., Levinson С. А., Phys. Rev., 97, 1344 (1955). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Приближенное сведение задачи многих тел для сильно взаимодействующих частиц к задаче о самосогласованном поле.
1418. Вгuesкнер К. А., Phys. Rev., 97, 1353 (1955). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Двухчастичные силы и ядерное насыщение. III. Детали структуры ядер.
1419. Вгuesкнер К. А., Phys. Rev., 100, 36 (1955). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Задача многих тел для сильно взаимодействующих частиц. II. Разделение по связанным группам.

1420. Вгюескнег К. А., Phys. Rev., **103**, 1121 (1956). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Соотношение между ядерной плотностью и ядерным потенциалом.
1421. Вгюескнег К. А., Wada W., Phys. Rev., **103**, 1008 (1956). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Ядерное насыщение и двухчастичные силы: самосогласованные решения и влияние принципа исключения.
1422. Вгюескнег К. А., Gammel J. L., Phys. Rev., **105**, 1679 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Решение задачи многих тел для ядра.
1423. Вгюескнег К. А., Sawada K., Phys. Rev., **106**, 6 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Газ Бозе — Эйнштейна с отталкивающим взаимодействием.
1424. Вгюескнег К. А., Gammel J. L., Phys. Rev., **109**, 1023 (1958). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Свойства ядерной материи.
1425. Вгюескнег К. А. (см. [2240, 4217]).
1426. Brust D., Phillips J. C., Bassani F., Phys. Rev. Lett., **9**, 94 (1962). (Гл. 5, § 5.)
Критические точки и коэффициент отражения полупроводников в ультрафиолетовой области.
1427. Brust D., Phys. Rev., **134**, A1337 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Электронные спектры кристаллических германия и кремния.
1428. Bube R. H., Proc. Inst. Rad. Eng., **43**, 1836 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводимость сульфида, селенида и теллурида цинка или кадмия.
1429. Bube R. H., Lind E. L., Phys. Rev., **105**, 1711 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводимость типа CdS в кристаллах ZnTe.
1430. Bube R. H., Lind E. L., Phys. Rev., **110**, 1040 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводимость кристаллов селенида цинка и корреляция между донорными и акцепторными уровнями в II—VI-фотопроводниках.
1431. Buckingham A. D., Journ. Chem. Phys., **23**, 2370 (1955). (Гл. 5, § 5.)
Количественное сравнение приближенной теории диэлектрической поляризации с точной теорией для малых плотностей.
1432. Buckingham A. D., Pople J. A., Trans. Faraday Soc., **51**, 1173, 1179 (1955).
Статистическая механика неидеальных полярных газов. I. Вторые вириальные коэффициенты. II. Диэлектрическая поляризация.
1433. Buckingham A. D., Proc. Roy. Soc., **A238**, 235 (1956). (Гл. 5, § 5; гл. 8, § 5.)
Теория диэлектрической поляризации полярных веществ.
1434. Buckingham A. D., Journ. Chem. Phys., **25**, 428 (1956). (Гл. 5 § 5; гл. 8, § 5.)
Теория диэлектрической проницаемости при больших напряженностях поля.
1435. Buckingham A. D., Pople J. A., Proc. Phys. Soc., **B69**, 1133 (1956).
Теория двойного лучепреломления в магнитном поле.
1436. Buckingham A. D., Pople J. A., Discuss. Faraday Soc., **22**, 17 (1956)
Электромагнитные свойства сжатых газов.
1437. Buckingham A. D., Coulson C. A., Lewis J. T., Proc. Phys. Soc., **A69**, 639 (1956).
Квадрупольный момент атома водорода в однородном поле.
1438. Buckingham A. D., Proc. Phys. Soc., **B70**, 753 (1957).
Влияние сильного магнитного поля на диэлектрическую проницаемость диамагнитной жидкости.

1439. Buckingham A. D., Raab R. E., Journ. Chem. Soc., 2341 (1957), (Гл. 5, § 5).
Молекулярная теория электрооптического эффекта Керра в жидкостях.
1440. Buckingham A. D., Pople J. A., Journ. Chem. Phys., 27, 820 (1957). (Гл. 5, § 5).
Электрические квадрупольные моменты и диэлектрические проницаемости.
1441. Buckingham A. D., Pople J. A., Proc. Camb. Phil. Soc., 53, 262 (1957). (Гл. 5, § 5).
Поляризация атома водорода в комбинированных электрическом и магнитном полях.
1442. Budd H. F., Phys. Rev., 131, 1520 (1963). (Гл. 2, § 4).
Гальваномагнитные явления в сильных электрических полях.
1443. Budd H. F., Phys. Rev., 134, A1281 (1964). (Гл. 2, § 4).
Низкотемпературные гальваномагнитные явления в сильном электрическом поле.
1444. Budzinski E. E., Schiff H., Canad. Journ. Phys., 35, 507 (1957). (Гл. 8, § 5).
Характеристические температуры кубических кристаллов.
1445. Буймистров В. М., Пекар С. И., ЖЭТФ, 32, 1193 (1957), 33, 1271 (1957). (Гл. 8, § 5).
Квантовые состояния частиц, взаимодействующих с гармонически колеблющимся континуумом, при произвольной силе связи. I. Случай отсутствия трансляционной симметрии. II. Случай трансляционной симметрии.
1446. Буймистров В. М., Укр. физ. журн., додаток, 2, 12 (1957). (Гл. 8, § 5).
Возбужденные состояния локального электронного центра, взаимодействующего с квантовым полем при произвольных значениях постоянной связи. I. Приложение к теории F - и F' -центров.
1447. Буймистров В. М., Дейген М. Ф., ФТТ, 1, 1463 (1959). (Гл. 5, § 5).
К теории примесного поглощения света в гомеополлярных кристаллах.
1448. Буймистров В. М., Писковой В. Н., ФТТ, 2, 608 (1960). (Гл. 5, § 5).
Исследование точности вариационного метода в задаче о примесном поглощении света в кремнии.
1449. Buley E. R., Cummings F. W., Phys. Rev., 134, A1454 (1964). (Гл. 5, § 5).
Динамика системы N атомов, взаимодействующих с полем излучения.
1450. Bullis W. M., Krag W. E., Phys. Rev., 101, 580 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11).
Эффект Холла в ориентированных монокристаллах германия n -типа.
1451. Bullis W. M., Phys. Rev., 109, 292 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11).
Гальваномагнитные эффекты в ориентированных монокристаллах германия n -типа.
1452. Bullis W. M. (см. [2297]).
1453. Буляница Д. С., Светлов Ю. Е., ФТТ, 4, 1339 (1962).
Некоторые свойства функций Блоха и Ванье.
1454. Burgas V., O'Sonno D., Nukleonika, 4, 119 (1959). (Гл. 8, § 1).
Взаимодействие нейтронов с фононами в твердых телах.
1455. Burdick G. A., Phys. Rev., 129, 138 (1963). (Гл. 3, § 10).
Зонная структура меди.

1456. Burley G., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 639 (1964).
Рентгеновское определение дебаевской температуры ионидов серебра.
1457. Burns F. P., Fleischer A. A., Phys. Rev., 107, 1281 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Пьезосопротивление антимолибдита индия.
1458. Burstein E., Bell E. E., Davisson J. W., Lax M., Journ. Chem. Phys., 57, 849 (1953). (Гл. 3, § 11.)
Оптические исследования примесных уровней в кремнии.
1459. Burstein E., Picus G. S., Gebbie H. A., Phys. Rev., 103, 825 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс на инфракрасных частотах в InSb при комнатной температуре.
1460. Burstein E., Picus G. S., Gebbie H. A., Blatt F., Phys. Rev., 103, 826 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Оптическая ширина запрещенной зоны InSb в магнитном поле.
1461. Burstein E., Picus G. S., Henviss B., Wallis R., Journ. Phys. Chem. Solids, 1, 65 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Спектр поглощения примесей в кремнии. I. Акцепторы III группы.
1462. Burstein E., Picus G. S., Phys. Rev., 105, 1123 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Межзонные магнетооптические эффекты в полупроводниках.
1463. Burstein E., Picus G. S., Wallis R. F., Blatt F., Phys. Rev., 113, 15 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Магнетооптическое исследование межзонных переходов в полупроводниках (эффект Зеемана).
1464. Burstein E., Picus G. S., Wallis R. F., Blatt F., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 395 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Магнетооптическое исследование зонной структуры (эффект Зеемана).
1465. Burstein E., Stiles P. J., Langenberg D. N., Wallis R. F., Phys. Rev. Lett., 9, 260 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Циклотронный резонанс Азбеля — Канера и полупроводниках и полуметаллах.
1466. Burstein E., Stiles P. J., Langenberg D. N., Wallis R. F., Semicond. Conf., Exeter, London, 1962, p. 345. (Гл. 2, § 4.)
Магнетооптические явления, связанные со свободными носителями: циклотронный резонанс Азбеля — Канера.
1467. Burstein E. (см. [3216, 3904, 4502—4504, 4629]).
1468. Busch G., Zs. Angew. Math. Phys., 1, 3, 81 (1950).
Электропроводность неметаллов.
1469. Butcher P. N., Proc. Phys. Soc., A64, 765 (1951). (Гл. 3, § 11, гл. 5, § 5.)
Поглощение света щелочными металлами.
1470. Butcher P. N., McLean T. P., Proc. Phys. Soc., 81, 219 (1963); 83, 579 (1964).
Нелинейные соотношения в твердых телах на оптических частотах. I. II.
1471. Butcher P. N., Hum D. M., Pike E. R., Proc. Roy. Soc., A280, 185 (1964)
ВКБ-приближение для блоховских электронов; применение к межзонным туннельным переходам.
1472. Buysers A. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 431 (1963).
Расчет работы выхода с поверхностей, образованных ионными кристаллами.
1473. Buysers W. J. L., Smith T., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 483 (1964).
Факторы Дебая — Уоллера в хлориде натрия.

1474. Бычков Ю. А., Гуревич Л. Е., Недлин Г. М., ЖЭТФ, 37, 534 (1959).
Термоэлектрические явления в сильных магнитных полях в металлах с различными поверхностями Ферми.
1475. Бычков Ю. А., ЖЭТФ, 39, 689 (1960). (Гл. 3, § 10.)
Квантовая теория электропроводности металлов в сильных магнитных полях.
1476. Бычков Ю. А., Горков Л. П., ЖЭТФ, 41, 1592 (1961).
Квантовые осцилляции термодинамических величин для металла в магнитном поле в модели ферми-жидкости.
1477. Calais J. L., Appel K., Journ. Math. Phys., 5, 1001 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Обращение циклических матриц.
1478. Calais J. L., Linderberg J., Theor. Chim. Acta, 3, 69 (1965). (Гл. 10, § 4.)
Атомные волновые функции для конфигураций $s^m p^n$, полученные с помощью техники проекционных операторов.
1479. Calais J. L., Arkiv. Fys., 28, 479, 511 (1965); 29, 255 (1965). (Гл. 10, § 4.)
Различные зоны для разных спинов. I. Энергия связи щелочного металла. II. Приложение к линейной цепочке атомов водорода. III. Твердый атомарный водород.
1480. Calais J. L., Arkiv. Fys., 28, 539 (1965). (Гл. 10, § 4.)
Кристаллические интегралы и молекулярные интегралы.
1481. Calais J. L. (см. [2354]).
1482. Calder R. S., Cochran W., Griffiths D., Lowde R. D., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 621 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Исследование гидрида лития с помощью дифракции рентгеновских лучей и нейтронов.
1483. Callaway J., Phys. Rev., 113, 1046 (1959).
Модель решеточной теплопроводности при низких температурах.
1484. Callaway J., Phys. Rev., 116, 1368 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Корреляционная энергия в модельном полупроводнике.
1485. Callaway J., Phys. Rev., 134, A998 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Оптическое поглощение в электрическом поле.
1486. Callaway J. (см. [1108, 1262, 2623, 3143]).
1487. Callen H. B., Phys. Rev., 76, 1394 (1949).
Электрический пробой ионных кристаллов.
1488. Callen H. B., Journ. Chem. Phys., 22, 518 (1954). (Гл. 2, § 4, гл. 3, § 11.)
Электронная структура, инфракрасное поглощение и эффект Холла в теллуре.
1489. Callies J. L., Rigaux C., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 1363 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Внутризонный эффект Фарадея в теллуре.
1490. Campbell E. S., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 197 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Существование «хорошо определенной» удельной энергии ионного кристалла; обоснование формул Эвальда и их применение к выводу уравнений для мультипольных решеток.
1491. Caput M. L., Amoros J. L., Publ. Dept. Crist. Min. (Madrid), 3, 15 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Изучение динамики решетки молекулярных кристаллов. VI. Диффузное рассеяние в бикарбонатах.

1492. Сапуф М. Л., Аморос J. L., Publ. Dep. Crist. Min. (Madrid), 3, 27 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Изучение динамики решетки молекулярных кристаллов. VII. Диффузное рассеяние в бикарбонатах.
1493. Сапуф М. Л., Аморос J. L., Journ. Phys. Chem. Solids, 21, 146 (1961). (Гл. 8, § 1.)
Температурная зависимость диффузного рассеяния рентгеновских лучей в молекулярных кристаллах. Нафталин.
1494. Сапуф М. Л. (см. [983, 985, 986, 4735]).
1495. Сагдопа М., Паул W., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 127 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Квадратичный фотоэлектроманнитный эффект в германии.
1496. Сагдопа М., Паул W., Вгрукс H., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 204 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Диэлектрическая проницаемость германия и кремния как функция объема.
1497. Сагдопа М., Паул W., Journ. Phys. Chem. Solids, 17, 138 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Зависимость ширины запрещенной зоны от давления в германии.
1498. Сагдопа М., Journ. Phys. Chem. Solids, 17, 336 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое определение структуры зоны проводимости GaSb.
1499. Сагдопа М., Zs. Phys., 161, 99 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое исследование зонной структуры GaSb.
1500. Сагдопа М., Phys. Rev., 121, 752 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Эффективные массы электронов в InAs и GaAs как функции температуры и легирования.
1501. Сагдопа М., Journ. Appl. Phys., 32, 958 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое изучение зонной структуры InP.
1502. Сагдопа М., Helv. Phys. Acta., 34, 796 (1961). (Гл. 5, § 5.)
Эффект Фогта в полупроводниках.
1503. Сагдопа М., Phys. Rev., 129, 1068 (1963). (Гл. 5, § 5.)
Коэффициент отражения в полупроводниках со структурой вюрцита.
1504. Сагдопа М., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 1543 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Зонные параметры полупроводников со структурами цинковой обманки, вюрцита и германия.
1505. Сагдопа М., Грeepaway D. L., Phys. Rev., 133, A1685 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства и зонная структура материалов $A^{IV}B^{VI}$ и V группы.
1506. Сагдопа М., Харлаке G., Phys. Rev., 137, A1467 (1965). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства и зонная структура кристаллов типа вюрцита и рутила.
1507. Сагми G., Боhm D., Phys. Rev., 133, A332 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Разделение движений в системах многих тел на динамически независимые части с помощью проекций на равновесные множества в фазовом пространстве. II.
1508. Сагми G. (см. [1285]).
1509. Сагоline D., Шгрибер J. E., Phil. Mag., 8, 71 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Влияние давления на поверхность Ферми в Ag и Cu.
1510. Сагрентер G. B., Journ. Chem. Phys., 32, 525 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Плотность связывающих электронов в алмазе.
1511. Сагг W. J., Jr., Phys. Rev., 122, 1437 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Энергия, удельная теплоемкость и магнитные свойства электронного газа малой плотности.

1512. Carr W. J., Jr., Coldwell-Horsfall R. A., Fein A. E., Phys. Rev., 124, 747 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Ангармонический вклад в энергию электронного газа малой плотности — интерполляция для корреляционной энергии.
1513. Carr W. J., Jr., Phys. Rev., 128, 120 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Энергия основного состояния металлического водорода. I.
1514. Carr W. J., Jr., Maradudin A. A., Phys. Rev., 133, A371 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Энергия основного состояния электронного газа высокой плотности.
1515. Carruthers J. A., Geballe T. H., Rosenberg H. M., Ziman J. M., Proc. Roy. Soc., A239, 502 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность германия и кремния от 2 до 300° К.
1516. Carruthers P., Phys. Rev., 114, 995 (1959).
Рассеяние фононов полями упругих деформаций и тепловое сопротивление дислокаций.
1517. Carter F. L., Mazelsky R., Journ. Phys. Chem. Solids, 28, 571 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Структура ZnSb: дальнейшие вопросы.
1518. Carter R. S., Hughes D. J., Palevsky H., Phys. Rev., 104, 271 (1956). (Гл. 8, § 1.)
Неупругое рассеяние медленных нейтронов колебаниями решетки ванадия.
1519. Carter R. S., Pelevsky H., Hughes D. J., Phys. Rev., 106, 1168 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Неупругое рассеяние медленных нейтронов колебаниями решетки алюминия.
1520. Cartz L., Proc. Phys. Soc., B68, 951, 957 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Тепловые колебания атомов в кубических кристаллах. I. Температурная зависимость теплового диффузного рассеяния рентгеновских лучей в монокристаллах свинца. II. Амплитуда колебаний атомов.
1521. Casimir H. B. G., Polder D., Phys. Rev., 73, 360 (1948). (Приложение 5, § 7.)
Влияние запаздывания на силы Лондона — Ван дер Ваальса.
1522. Casimir H. B. G., Journ. Chim. Phys., 46, 407 (1949). (Приложение 5, § 7.)
О силах Лондона — Ван дер Ваальса.
1523. Caspari M. E., Merz W. J., Phys. Rev., 80, 1082 (1950). (Гл. 8, § 5.)
Электромеханические свойства монокристаллов BaTiO₃.
1524. Caspari M. E. (см. [4050]).
1525. Casselman T. N., Markham J. J., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 669 (1963). (Гл. 8, § 5.)
О некоторых эффектах, связанных с влиянием искажений решетки на нормальные колебания.
1526. Castle J. G., Jr., Chandrasekhar B. S., Rayne J. A., Phys. Rev. Lett., 6, 409 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в индии.
1527. Castner T. G., Königzig W., Woodruff T. O., Nuovo Cimento, Suppl., 7, 612 (1958).
Электронная структура V-центра.
1528. Castner T. G., Phys. Rev. Lett., 8, 13 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Прямое измерение долинно-орбитального расщепления уровней мелких доноров в кремнии.
1529. Chambers R. G., Proc. Roy. Soc., A202, 378 (1950). (Гл. 5, § 1.)
Проводимость тонких проволок в магнитном поле.

1530. Chambers R. G., Proc. Roy. Soc., A215, 481 (1952). (Гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект.
1531. Chambers R. G., Proc. Phys. Soc., A65, 458 (1952).
Кинетическая формулировка задач о проводимости.
1532. Chambers R. G., Phil. Mag., 1, 459 (1956). (Гл. 3, § 8; гл. 5, § 1.)
Циклотронный резонанс в условиях аномального скин-эффекта.
1533. Chambers R. G., Canad. Journ. Phys., 34, 1395 (1956).
Наши сведения о поверхности Ферми.
1534. Chambers R. G., Proc. Roy. Soc., A238, 344 (1957). (Гл. 3, § 10.)
Эффекты магнетосопротивления в металлах I группы при высоких полях.
1535. Chambers R. G., The Fermi Surface, New York, 1960, p. 100. (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление.
1536. Chambers R. G., Proc. Phys. Soc., 78, 941 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Инверсия кривых удельной теплоемкости.
1537. Chambers R. G., Proc. Roy. Soc., A270, 417 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Измерение эффекта Холла при высоких полях индуктивным методом.
1538. Chambers R. G., (см. [1035]).
1539. Chambers W. G., Proc. Phys. Soc., 81, 877 (1963).
Замечание о математических особенностях уравнения Больцмана
1540. Chambers W. G., Proc. Phys. Soc., 84, 181 (1964).
Магнитный пробой в простой модели.
1541. Chambers W. G., Proc. Phys. Soc., 84, 941 (1964).
Магнитный пробой и затухание ультразвука в двумерной модели
1542. Champress C. H., Proc. Phys. Soc., B69, 1335 (1956).
Статика двухвалентных примесных центров в полупроводнике.
1543. Champress C. H., Chastar R. P., Journ. Electron. Control., 3, 494 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Поперечное магнетосопротивление в арсениде индия.
1544. Champress C. H., Journ. Electron. Control., 4, 201 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Поперечное магнетосопротивление в антимониде индия.
1545. Chandrasekhar S., Proc. Roy. Soc., A259, 531 (1961). (Гл. 5, § 5.)
Дисперсия оптической вращательной способности кристаллов.
1546. Чанышев С. И., Згаевский В. Э., ФТТ, 2, 2461 (1960).
К вопросу о температурной зависимости химического потенциала полупроводника.
1547. Чеглоков Е. И., ФТТ, 6, 1834 (1964).
О симметрии решений уравнений Хартри—Фока для кристаллов.
1548. Чеглоков Е. И., ФТТ, 6, 1845 (1964) (Гл. 3, § 11.)
Возможная структура валентных зон кристаллов гексагональных селена и теллура.
1549. Chen C. W., Phys. Rev., 129, 121 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронные структуры Fe—Co сплавов с марганцем в качестве примеси замещения.
1550. Черепанов В. И., Физ. мет. и металловед., 4, 212 (1957). (Гл. 5, § 5.)
О принципиальной возможности «внутризонного» механизма поглощения света в твердых телах.
1551. Черепанов В. И., ФТТ, 1, 1035 (1959). (Гл. 5, § 5.)
К теории оптических свойств электронных полупроводников в инфракрасной области спектра.
1552. Черепанов В. И. (см. [4399]).

1553. Chester G. V., Houghton A., Proc. Phys. Soc., 73, 609 (1959).
Электрон-фононное взаимодействие в металлах. I. Гармоническое приближение.
1554. Chester G. V., Thellung A., Proc. Phys. Soc., 73, 745 (1959).
Об электропроводности металлов.
1555. Chester G. V., Adv. Phys., 10, 357 (1961).
Теория взаимодействия электронов с колебаниями решетки в металлах.
1556. Chester G. V., Proc. Phys. Soc., 81, 938 (1963).
Уравнение Больцмана для неоднородных электрических полей.
1557. Четкарёв М. Л., ЖТФ, 28, 962 (1958).
Относительно изменения ионизационной энергии в примесных полупроводниках.
1558. Choyske W. J., Patrick L., Phys. Rev., 105, 1721 (1947). (Гл. 3, § 11.)
Поглощение света α -модификацией SiC вблизи края зоны.
1559. Christian J. W., Spreadborough J., Proc. Phys. Soc., B70, 1151 (1957).
Дефекты упаковки и дислокации в медь-алюминиевых и кобальт-никелевых сплавах.
1560. Чуенков В. А., ЖТФ, 28, 470 (1958). (Гл. 3, § 11.)
К поведению валентных полупроводников типа германия в сильном электрическом поле.
1561. Чуенков В. А., Изв. АН СССР, сер. физич., 22, 363 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Поведение валентных кристаллов типа германия в сильном электрическом поле.
1562. Чуенков В. А., ФТТ, 2, 799 (1960).
Электропроводность валентных полупроводников при низких температурах в сильных электрических полях.
1563. Chynoweth A. G., Wannier G. H., Logan R. A., Thomas D. E., Phys. Rev. Lett., 5, 57 (1959).
Наблюдение штарковского расщепления в энергетических зонах с помощью туннельных переходов
1564. Ciccagello I. S., Dransfeld K., Phys. Rev., 134, A1517 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поглощение ультразвука на микроволновых частотах при низких температурах в MgO и Al₂O₃.
1565. Ciccagello I. S., (см. [3708]).
1566. Clark B. C., Casis D. C., Wallis R. F., Phys. Rev., 134, A1486 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Колебательный спектр объемноцентрированных кубических решеток.
1567. Clark C. B., Phys. Rev., 125, 1898 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Расчет удельной теплоемкости решетки для семи объемноцентрированных кубических элементов.
1568. Clark C. D., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 481 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Край спектра поглощения в алмазе.
1569. Clark C. D., Dean P. J., Harris P. V., Proc. Roy. Soc., A277, 312 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Край собственного поглощения в алмазе.
1570. Clarke D. H., Journ. Electron. Control, 3, 375 (1957).
Время жизни в полупроводнике как функция концентрации рекомбинационных уровней.
1571. Clegg P. E., Mitchell E. W. J., Proc. Phys. Soc., 84, 31 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Дырочная масса плотности состояний в полупроводниковом алмазе.

1572. Слемтов P. C., Wilson A. J., Proc. Roy. Soc., A237, 117 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Дисперсионное уравнение для плазменных колебаний.
1573. Clendenen G. L., Drickamer H. G., Phys. Rev., 135, A1643 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Влияние давления на объем и параметры решетки магния.
1574. Clinton W. J., Rice B., Journ. Chem. Phys., 30, 542 (1959).
Новая формулировка теоремы Яна — Теллера.
1575. Clogston A. M., Phys. Rev., 125, 439 (1962). (Приложение 2, § 1.)
Примесные состояния в металлах.
1576. Clogston A. M., Phys. Rev., 136, A1417 (1964).
Примесные состояния в переходных металлах.
1577. Сошгап W., Acta Cryst., 7, 503 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Влияние анизотропии тепловых колебаний на атомный фактор.
1578. Сошгап W., Proc. Roy. Soc., A253, 260 (1959). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Теория колебаний решетки германия.
1579. Сошгап W., Phil. Mag., 4, 1082 (1959). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Динамика решетки щелочногалогидных кристаллов.
1580. Сошгап W., Zs. Krist., 112, 465 (1959). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Диэлектрические проницаемости и колебания решетки кубических ионных кристаллов.
1581. Сошгап W., Phys. Rev. Lett., 2, 495 (1959). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Теория колебаний решетки германия.
1582. Сошгап W., Phys. Rev. Lett., 3, 412 (1959). (Гл. 8, § 3 и 5; гл. 9, § 5.)
Устойчивость кристалла и теория сегнетоэлектричества.
1583. Сошгап W., Proc. Roy. Soc., A253, 260 (1959). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Теория колебаний решетки германия.
1584. Сошгап W., Adv. Phys., 9, 387 (1960). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Устойчивость кристалла и теория сегнетоэлектричества.
1585. Сошгап W., Nature, 191, 60 (1961). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
«Эффективный» ионный заряд в кристаллах.
1586. Сошгап W., Gray G. J., Johnson F. A., Quarrington J. E., Williams N., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2102 (1961). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Решетчатое поглощение в арсениде галлия.
1587. Сошгап W., Adv. Phys., 10, 401 (1961). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Устойчивость кристалла и теория сегнетоэлектричества. II. Пьезоэлектрические кристаллы.
1588. Сошгап W., Cowley R. A., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 447 (1962). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Диэлектрические проницаемости и колебания решетки.
1589. Сошгап W., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962. (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Обзор по колебаниям решетки.
1590. Сошгап W., Proc. Roy. Soc., A276, 308 (1963). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Динамика решетки натрия.
1591. Сошгап W., Rep. Progr. Phys., 26, 1 (1963). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Колебания решетки.
1592. Сошгап W., Pawley G. S., Proc. Roy. Soc., A280, 1 (1964). (Гл. 8, § 1.)
Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей в молекулярных кристаллах.

1593. Cochran W., Phillips J. C., Phys. Rev., **134**, A1402 (1964). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Микроскопическая диэлектрическая восприимчивость германия.
1594. Cochran W. (см. [1482, 1658, 4864, 4867]).
1595. Cohen M. H., Keffer F., Phys. Rev., **99**, 1128 (1955). (Гл. 10, § 4.)
Дипольные суммы в простейших кубических решетках.
1596. Cohen M. H., Heine V., Adv. Phys., **7**, 395 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Зонные структуры щелочных и благородных металлов и α -фазы их сплавов.
1597. Cohen M. H., Phil. Mag., **3**, 762 (1958).
Оптические постоянные, теплоемкость и поверхность Ферми.
1598. Cohen M. H., Harrison M. J., Harrison W. A., Phys. Rev., **117**, 937 (1960).
Зависимость затухания ультразвука в металлах от магнитного поля.
1599. Cohen M. H., Ham F. S., Journ. Phys. Chem. Solids, **18**, 177 (1960).
Эффективная масса электронов в твердом теле. Обобщение формулы Бардина.
1600. Cohen M. H., Blount E. I., Phil. Mag., **5**, 115 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
 g -Фактор и эффект де Гааза — ван Альфена для электронов в висмуте.
1601. Cohen M. H., Falicov L. M., Phys. Rev. Lett., **7**, 231 (1961).
Магнитный пробы в кристаллах.
1602. Cohen M. H., Journ. Phys. Rad., **23**, 643 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Межатомные взаимодействия в металлах.
1603. Cohen M. H., Phys. Rev., **130**, 1301 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Обобщенная теория самосогласованного поля и диэлектрическая формулировка задачи многих тел.
1604. Cohen M. H., Phillips J. C., Phys. Rev. Lett., **12**, 662 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Свидетельство о новом коллективном резонансе в металле со «свободными электронами».
1605. Cohen M. H., Phys. Rev., **137**, A497 (1965).
Обобщенная теория самосогласованного поля: факторизация Горькова.
1606. Cohen M. H. (см. [1930]).
1607. Coldwell-Horsfall R. A., ter Haar D., Physica, **23**, 1126 (1957).
Об определении формы поверхности Ферми.
1608. Coldwell-Horsfall R. A., ter Haar D., Phys. Rev., **115**, 891 (1959). (Гл. 3, § 10; гл. 11, § 7.)
Влияние коллективных эффектов на магнетосопротивление металлов.
1609. Coldwell-Horsfall R. A., Magarudin A. A., Journ. Math. Phys., **1**, 395 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Нулевая энергия электронной решетки.
1610. Coldwell-Horsfall R. A., Phys. Rev., **129**, 22 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Соотношение между упругими постоянными и силовыми постоянными второго и третьего порядков для гранцентрированных и объемноцентрированных кубических решеток.
1611. Coldwell-Horsfall R. A. (см. [1512]).
1612. Cole H., Warren B. E., Journ. Appl. Phys., **23**, 355 (1952). (Гл. 8, § 1.)
Приближенный упругий спектр β -модификации меди по данным о рассеянии рентгеновских лучей.
1613. Cole H., Journ. Appl. Phys., **24**, 482 (1953). (Гл. 8, § 1.)
Приближенный упругий спектр акустических волн в AgCl по данным о рассеянии рентгеновских лучей.

1614. Cole H., Kineke E., Phys. Rev. Lett., 1, 360 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Спектр колебаний решетки Si и Ge.
1615. Cole H., IBM Journ. Res. Developm., 3, 126 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Межатомные силовые постоянные из закона центральных сил.
1616. Cole H. (см. [1148]).
1617. Coleman R. V., Fines A. J., Plaskett J. S., Тарр С. М., Phys. Rev., 133, A521 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Расчет и сравнение с экспериментом магнетосопротивления благородных металлов.
1618. Coleman R. V. (см. [2178]).
1619. Coles V. R., Proc. Phys. Soc., B65, 221 (1952). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура и физические свойства сплавов систем никель—медь и палладий—серебро.
1620. Coles V. R., Phil. Mag., 44, 915 (1953). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура переходных металлов в сплавах.
1621. Coles V. R., Phys. Rev., 101, 1245 (1956). (Гл. 2, § 4.)
О значении измерений эффекта Холла на сплавах.
1622. Coles V. R., Adv. Phys., 7, 40 (1958).
Влияние спинового разупорядочения на электрическое сопротивление металлов и сплавов.
1623. Collins J. G., Appl. Sci. Res., B7, 1 (1958). (Гл. 5, § 1.)
Теория аномального скин-эффекта в металлах при наклонном падении излучения.
1624. Collins M. F., Proc. Phys. Soc., 80, 362 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки магния.
1625. Companion A. L., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 357 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптическая ширина запрещенной зоны окиси скандия.
1626. Condon J. H., Marcus J. A., Phys. Rev., 134, A446 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми кальция из эффекта де Гааза — ван Альфена.
1627. Conklin J. B., Jr., Johnson L. E., Pratt G. W., Jr., Phys. Rev., 137, A1282 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Энергетические зоны в PbTe.
1628. Connell P. A., Marcus J. A., Phys. Rev., 107, 940 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Низкотемпературные гальваномагнитные эффекты в монокристаллах висмута.
1629. Conway J. M., Greenwood D. A., Krumhansl J. A., Martienssen W., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 239 (1963). (Гл. 5, § 5.)
Силы осциллятора для оптического поглощения ионами серебра в щелочногалогенидных кристаллах.
1630. Conwell E., Weisskopf V. F., Phys. Rev., 77, 388 (1950).
Теория примесного рассеяния в полупроводниках.
1631. Conwell E., Phys. Rev., 103, 51 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Проводимость по примесной зоне в германии и кремнии.
1632. Conwell E., Proc. Inst. Rad. Eng., 46, 1281 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Свойства кремния и германия. II.
1633. Conwell E., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 262 (1959).
Решеточная подвижность горячих носителей.
1634. Conwell E., Brown A. L., Journ. Phys. Chem. Solids, 15, 208 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние горячих носителей в германии.
1635. Conwell E., Levinger B. W., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 227.
Зонная структура сильно легированных полупроводников.

1636. Conwell E., Phys. Rev., 135, A814 (1964).
Возмущение фононного распределения горячими электронами.
1637. Conwell E., Phys. Rev., 135, A1138 (1964).
Относительные потери энергии электронов на генерацию оптических и акустических фононов при лавинном пробое в германии.
1638. Conwell E., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 593 (1964).
Функции распределения фононов и электронов в сильных электрических полях.
1639. Conwell E. (см. [1725, 4980]).
1640. Cooper B. R., Ehrenreich H., Philipp H. R., Phys. Rev., 138, A494 (1965). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства благородных металлов. II.
1641. Cooper B. R., Saunders G. A., Lawson A. W., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 1277 (1964).
Электрическое сопротивление и термо-э. д. с. InBi и In_2Bi .
1642. Cooper J. R. A., Raimes S., Phil. Mag., 4, 145 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Влияние анизотропии времен релаксации на постоянные Холла некоторых разбавленных сплавов серебра.
1643. Cooper J. R. A., Raimes S., Phil. Mag., 4, 1149 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Обобщение теории влияния анизотропии времени релаксации на постоянные Холла некоторых разбавленных сплавов серебра.
1644. Corak W. S., Garfinkel M. P., Satterthwaite C. B., Wexler A., Phys. Rev., 98, 1699 (1955). (Гл. 1, § 4.)
Атомные теплоты меди, серебра и золота от 1 до 5°K .
1645. Corciovei A., Nuovo Cimento, 11, 118 (1959).
Влияние дальнего и ближнего порядка на остаточное сопротивление.
1646. Corless G. K., March N. H., Phil. Mag., 6, 1285 (1961).
Электронная теория взаимодействия точечных дефектов в металлах.
1647. Cornish A. J., Journ. Electrochem. Soc., 106, 685 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Ряды неорганических полупроводниковых соединений.
1648. Costa P., Lallement R., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 559 (1964).
Изучение электронной структуры карбидов тория, урана и плутония.
1649. Coulson C. A., Redei L. B., Stocker D., Proc. Roy. Soc., A270, 357 (1962). (Гл. 11, § 1.)
Электронные свойства тетраэдрических интерметаллических соединений. I. Распределение заряда.
1650. Coulson C. A., Sharma C. S., Proc. Phys. Soc., 79, 920 (1962).
Поправки на самодействие в методе Томаса — Ферми с приложением к f -электронам в атомах.
1651. Coulson C. A., (см. [1437, 4280]).
1652. Coomes A., Journ. Phys. Rad., 21, 229 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Коллективные колебания системы дырок в присутствии фононов.
1653. Cowley J. M., Rees A. L. G., Rep. Progr. Phys., 21, 165 (1958).
Фурье-методы в дифракционном структурном анализе, основанном на дифракции электронов.
1654. Cowley R. A., Proc. Roy. Soc., A268, 109 (1962). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 3.)
Динамика решетки ионных и ковалентных кристаллов.
1655. Cowley R. A., Proc. Roy. Soc., A268, 121 (1962). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5; гл. 10, § 4.)
Упругие и диэлектрические свойства кристаллов с поляризуемыми атомами.

1656. Cowley R. A., *Acta Cryst.*, 15, 687 (1962). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5; гл. 10, § 4.)
Некоторые расчеты с помощью преобразования Эвальда.
1657. Cowley R. A., *Phys. Rev. Lett.*, 9, 159 (1962). (Гл. 8, § 5, гл. 9, § 5.)
Температурная зависимость поперечных оптических мод в титанате стронция.
1658. Cowley R. A., Cochran W., Brockhouse B. N., Woods A. D. B., *Phys. Rev.*, 131, 1030 (1963). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Динамика решетки щелочногалогидных кристаллов. III. Теория.
1659. Cowley R. A., *Adv. Phys.*, 12, 421 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки ангармонического кристалла.
1660. Cowley R. A., *Proc. Phys. Soc.*, 84, 281 (1964). (Гл. 8; § 5.)
Теория рамановского рассеяния в кристаллах.
1661. Cowley R. A., *Phys. Rev.*, 134, A981 (1964). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Динамика решетки и фазовые переходы в титанате стронция.
1662. Cowley R. A. (см. [1588, 4867]).
1663. Craig D. P., Thirumanchandran T., *Proc. Roy. Soc.*, A271, 207 (1963).
Электронные спектры смешанных кристаллов.
1664. Crawford J. H., Jr., Schweinler H. C., Stevens D. K., *Phys. Rev.*, 99, 1330 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Магнитные данные о структуре зоны проводимости Ge.
1665. Gribier D., *Acta Cryst.*, 6, 293 (1953). (Гл. 8, § 1.)
Тепловые колебания атомов, внедренных в кристалл: случай структуры типа флюорита.
1666. Gribier D., *Rev. Mod. Phys.*, 30, 228 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние рентгеновских лучей тепловыми колебаниями решетки и эффект Комптона во флюорите.
1667. Cross L. E., *Phil. Mag.*, 1, 76 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Термодинамическая трактовка сегнетоэлектричества и антисегнетоэлектричества в псевдокубических диэлектриках.
1668. Cruickshank D. W. J., *Acta Cryst.*, 9, 747 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Определение анизотропии теплового движения атомов в кристаллах.
1669. Cruickshank D. W. J., *Acta Cryst.*, 9, 754 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Анализ анизотропного теплового движения молекул в кристаллах.
1670. Cruickshank D. W. J., *Acta Cryst.*, 10, 1005 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Изменение амплитуд колебаний с температурой в некоторых молекулярных кристаллах.
1671. Cruickshank D. W. J., *Rev. Mod. Phys.*, 30, 163 (1958). (Гл. 8, § 5.)
О колебаниях решетки бензола, нафталина и антрацена.
1672. Csavinsky P., *Journ. Phys. Chem. Solids*, 24, 1003 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Поправки к энергиям основного состояния мелких доноров в кремнии и германии.
1673. Csavinsky P., *Phys. Rev.*, 131, 2033 (1963); 135, A83 (1964).
Рассеяние на ионизованных примесях в вырожденных полупроводниках. Комбинация вариационной техники и техники теорий возмущений в методе парциальных волн.
1674. Cuff K. F., Ellett M. R., Kuglin C. D., *Journ. Appl. Phys.*, 32 (Suppl.), 2179 (1961). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления в зоне проводимости PbTe.
1675. Cuff K. F., Ellett M. R., Kuglin C. D., *Semicond. Conf.*, Exeter, 1962, London, 1962, p. 316. (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и кинетические свойства PbTe.

1676. Cuff K. F. (см. [3124]).
1677. Curie D., Journ. Phys. Rad., 17, 16 (1956).
Примесные уровни в кристаллах (водородная модель).
1678. Curie D. Journ. Phys. Rad., 17, 699 (1956).
Теоретическое и экспериментальное исследование некоторых свойств электронных ловушек и излучающих центров в сульфидах.
1679. Curie D., Journ. Phys. Rad., 18, 214 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Модели различных типов ловушек в фосфоресцирующем сульфиде цинка. Термическое и оптическое высвобождение захваченных электронов
1680. Curie D., Journ. Phys. Rad., 19, 694 (1958).
Использование эффективной и истинной массы электрона в полупроводниках.
1681. Curie D., Compt. Rend., 246, 2116 (1958).
Водородоподобная модель примесных уровней в ионных кристаллах. Эффективная диэлектрическая проницаемость для возбужденных состояний.
1682. Curien H., Acta Cryst., 5, 393 (1952). (Гл. 8, § 1.)
Тепловое рассеяние рентгеновских лучей в монокристаллах α -фазы железа и динамика гранцентрированных кубических решеток.
1683. Curien H., Journ. Phys. Rad., 16, 44S (1955). (Гл. 8, § 1.)
Тепловое движение атомов в кристаллах и рассеяние рентгеновских лучей; случай натрия.
1684. Cutler M., Fitzpatrick R. L., Leavy J. F., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 319 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Зона проводимости сульфида церия, $Ce_{1-x}S_x$.
1685. Cutler M., Leavy J. F., Fitzpatrick R. L., Phys. Rev., 133, A1143 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Явления электронного переноса в полуметаллическом сульфиде цезия.
1686. Cutler M., Leavy J. F., Phys. Rev., 133, A1153 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Явления электронного переноса в высокоомном сульфиде цезия.
1687. Dalgarno A., Lynn N., Proc. Phys. Soc., A70, 802 (1957). (Приложение 5, § 6.)
Свойства атома гелия.
1688. Dang G. D., Klein A., Phys. Rev., 130, 2572 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Высшие приближения метода беспорядочных фаз в теории электронного газа.
1689. Daniel E., Vosko S. H., Phys. Rev., 120, 2041 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Распределение по импульсам в газе взаимодействующих электронов.
1690. Daniel E., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 975 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Об электрических и магнитных свойствах разбавленных сплавов переходных металлов медью, золотом и водородистым палладием.
1691. Daniel M. R., Maskinpon L., Phil Mag., 8, 537 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Магнетоакустический эффект и поверхность Ферми кадмия.
1692. Daniel M. R. (см. [3420]).
1693. Даниленко В. М., Кривоглаз М. А., Матыгина З. А., Смирнов А. А., Физ. мет. и металловед., 4, 28 (1957).
К теории рассеяния волн кристаллической решеткой твердых растворов.
1694. Darby J. K., March N. H., Proc. Phys. Soc., 84, 591 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Электрон-фононное взаимодействие и температурная зависимость электрического сопротивления натрия.

1695. Dagnell A. J., Libby W. F., Phys. Rev., 135, A1453 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Искусственные металлы: InSb, сплавы Sn с InSb и металлический InTe.
1696. Das P., Phys. Rev., 138, A590 (1965).
Микроволновая проводимость горячих электронов в многодолинных полупроводниках.
1697. Das P., (см. [3690]).
1698. Das S. B., Gerritsen A. N., Phys. Rev., 135, A1081 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Отклонения от правил Матиссена, обусловленные возможными изменениями фононного спектра разбавленных сплавов магния.
1699. Das T. P., Jette A. N., Kpox R. S., Phys. Rev., 134, A1079 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Теория оптических и магнитных свойств автолокализованных дырок во фториде лития.
1700. Das T. P. (см. [1795]).
1701. Das Gupta K., Nature, 186, 563 (1950); 167, 313 (1951).
Новый тип рентгеновского рассеяния. I, II.
1702. Dash W. C., Newsham R., Phys. Rev., 99, 1151 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Собственное оптическое поглощение в монокристаллическом германии и кремнии при 77 и 311° К.
1703. Datars W. R., Dexter R. N., Phys. Rev., 124, 75 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в Sb.
1704. Datars W. R., Canad. Jour. Phys., 39, 1922 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в сурьме.
1705. Datars W. R., Canad. Jour. Phys., 40, 1784 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в сурьме при 35 и 70 Гц.
1706. Datars W. R., Canad. Jour. Phys., 41, 712 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в KCl.
1707. Date M., Jour. Phys. Soc. Japan, 15, 1488 (1960).
Магнетоплазменный резонанс в полупроводниках. I.
1708. Davidson E. R., Jones L. L., Jour. Chem. Phys., 37, 1918 (1962).
Корреляционное расщепление в молекуле водорода.
1709. Dawber P. G., Elliott R. J., Proc. Phys. Soc., 81, 453 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Теория оптического поглощения колебаниями дефектов в кремнии.
1710. Dawber P. G., Elliott R. J., Proc. Roy. Soc., A273, 222 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Колебания атома с другой массой в кубическом кристалле.
1711. Dayal V., Singh S. P., Proc. Phys. Soc., 76, 777 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Корректная нумерация частот колебаний в зоне Бриллюэна.
1712. Dayal V., Sharan V., Proc. Roy. Soc., A259, 361 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Использование модификации электронного газа при вычислении частот колебаний и удельной теплоемкости лития.
1713. Dayal V., Sharan V., Proc. Roy. Soc., A262, 136 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Использование модификации электронного газа при вычислении частот колебаний и удельных теплоемкостей натрия и калия.
1714. Dayal V., Tripathi V. B., Proc. Phys. Soc., 77, 303 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Пересмотр келлермановских расчетов удельных теплоемкостей хлористого натрия.

1715. Dayal B., Singh S. P., Proc. Phys. Soc., 78, 1495 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Об участии электронного газа в колебаниях решетки.
1716. Dayal B., Tripathi B. B., Proc. Roy. Soc., A260, 122 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Соотношения Фукса и вклад свободных электронов в упругие постоянные металлов.
1717. Dayal B., Srivastava R. S., Proc. Roy. Soc., A270, 212 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Спектр колебаний серебра, основанный на металлическом взаимодействии.
1718. Dean P., Proc. Roy. Soc., A254, 507 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные спектры двухатомных цепочек.
1719. Dean P., Marti J. L., Proc. Phys. Soc., 75, 452 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Функциональные уравнения для колебательных спектров двухатомных цепочек.
1720. Dean P., Proc. Roy. Soc., A260, 263 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные спектры двухатомных цепочек. II.
1721. Dean P., Vasop M. D., Proc. Phys. Soc., 81, 642 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Природа колебательных мод в неупорядоченных системах.
1722. Dean P. (см. [1069]).
1723. Deaton B. C., Gavenda J. D., Phys. Rev., 136, A1096 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Ультразвуковое исследование открытых орбит в кадмии и цинке.
1724. Deaton B. C. (см. [2234]).
1725. Debye P. P., Conwell E. M., Phys. Rev., 93, 693 (1954). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства германия n -типа.
1726. De Graaf A. M., Helv. Phys. Acta, 35, 652 (1962). (Гл. 3, § 11.)
О диамагнетизме электронов проводимости в щелочных металлах.
1727. De Heer J., Journ. Chem. Phys., 37, 2080 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Исследования альтернантных молекулярных орбит. III. Формула со многими параметрами для энергии систем с замкнутыми оболочками.
1728. De Heer J., Journ. Phys. Chem., 66, 2288 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Усовершенствованная трактовка основного состояния бензола по методу альтернантных молекулярных орбит.
1729. De Heer J., Rev. Mod. Phys., 35, 631 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Метод разных орбит для разных спинов и его применение к ароматическим углеводородам.
1730. De Heer J., Raupcz R., Journ. Chem. Phys., 39, 2314 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Исследования по методу альтернантных молекулярных орбит. VI. Формула со многими параметрами для энергии состояний разной мультиплетности. Приложение к бензолу.
1731. De Heer J. (см. [3842, 3662]).
1732. Dehlinger U., Zs. Naturforsch., 8a, 67 (1953).
Энтропия электронов в металлической решетке.
1733. Дейген М. Ф., Винецкий В. Л., ЖЭТФ, 32, 289 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Квантовые состояния и оптические переходы электрона F_2^+ -центра.
1734. Дейген М. Ф., Винецкий В. Л., ЖЭТФ, 32, 1382 (1957).
Взаимодействие носителей тока и F -центров с акустическими колебаниями решеток ионных кристаллов.
1735. Дейген М. Ф., Дыкман И. М., Толпыго К. Б., ЖТФ, 27, 1628 (1957).
Всесоюзное совещание по теории полупроводников.

1736. Дейген М. Ф. (см. [1447, 2286, 4743]).
1737. Дехтяр И. Я., УФН, **62**, 99 (1957).
Дефекты кристаллического строения и некоторые свойства металлов и сплавов.
1738. Дехтяр И. Я., Физ. мат. и металловед., **5**, 17 (1957). (Гл. 3, § 11.)
О состоянии атомов в сплавах переходных элементов.
1739. De Laupaу J., Journ. Chem. Phys., **21**, 1975 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Динамика объемноцентрированных и гранецентрированных кубических решеток металлических элементов.
1740. De Laupaу J., Journ. Chem. Phys., **24**, 1071 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Характеристическая температура Дебая при 0° К для некоторых кубических кристаллов.
1741. De Laupaу J., Solid State Phys., **2**, 219 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Теория удельных теплоемкостей и колебаний решетки.
1742. De Laupaу J., Journ. Chem. Phys., **26**, 663 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Динамика объемноцентрированных и гранецентрированных кубических решеток металлических элементов. III. Кубические инвариантные полиномы.
1743. De Laupaу J., Dolocsek R. L., Webber R. T., Journ. Phys. Chem. Solids, **11**, 37 (1959); Physica, **24**, S172 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление меди.
1744. De Leener M., Bellemans A., Phys. Lett., **4**, 157 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Энергия основного состояния электронного газа в решетке положительных ионов.
1745. De Leener M. (см. [1174]).
1746. De Loach B. C., Shaffer W. H., Journ. Chem. Phys., **24**, 1114 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Замечание о колебаниях линейных цепочек частиц.
1747. Delves R. T., Proc. Phys. Soc., **73**, 572 (1959).
Теоретические значения кинетических коэффициентов для полярных полупроводников.
1748. Delves R. T., Journ. Phys. Chem. Solids, **24**, 885 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Сплавы HgTe—MnTe. II. Электрические свойства.
1749. De Magco J. J., Weiss R. J., Phys. Rev., **137**, A1869 (1965). (Гл. 6, § 2.)
Абсолютные факторы рассеяния рентгеновских лучей для кремния и германия.
1750. De Magco J. J. (см. [4817]).
1751. De Marcus W. C., Journ. Chem. Phys., **23**, 602 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Нулевая энергия одноатомных кристаллов.
1752. Демиденко З. А., ФТТ, **3**, 803 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Расчет внутреннего поля в кристаллах типа NaCl и алмаза.
1753. Демиденко З. А., Толпыго К. Б., ФТТ, **3**, 3435 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные колебания щелочногалогидных кристаллов с ионами, существенно отличающимися по размерам.
1754. Демиденко З. А., Кучер Т. И., Толпыго К. Б., ФТТ, **4**, 104 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Частоты и амплитуды колебаний атомов кристалла типа алмаза для волнового вектора, направленного по диагонали грани куба.
1755. Depke S. P., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 1397 (1964).
Зависимость между зонной структурой и химической связью и образованием пустых узлов в TiO.
1756. De Nobel J., Physica, **23**, 349 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность и электропроводность вольфрама. Экспериментальные результаты для монокристаллов и сравнение их с теорией.

1757. Deresiewicz H., Mindlin R. D., Journ. Appl. Phys., 28, 669 (1957).
Волны на поверхности кристалла.
1758. Dermitt G., Phys. Rev., 127, 1110 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Альтернантные орбиты в кристаллах.
1759. Deschamps R., Compt. Rend., 255, 659 (1962).
Соотношение между степенями ионности кристаллов и молекул.
1760. Des Cloiseaux J., Phys. Rev., 135, A685 (1964).
Электрические зоны и проекционные операторы в кристалле; аналитические и асимптотические свойства.
1761. Des Cloiseaux J., Phys. Rev., 135, A698 (1964).
Аналитические свойства n -мерных энергетических зон и функций Ванье.
1762. Des Cloiseaux J. (см. [929]).
1763. Deutsch T., Paul W., Brooks H., Phys. Rev., 124, 753 (1961). (Гл. 2, § 4, гл. 3, § 11.)
Зависимость постоянной Холла щелочных металлов от давления.
1764. Devonshire A. F., Phil. Mag., 40, 1040 (1949); 42, 1065 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Теория титаната бария. I, II.
1765. Devonshire A. F., Adv. Phys., 3, 85 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Теория сегнетоэлектриков.
1766. Devonshire A. F., Phil. Mag., 2, 1027 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Теория сегнетовой соли.
1767. Devonshire A. F., Rep. Progr. Phys., 27, 1 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Некоторые последние работы по сегнетоэлектрикам.
1768. Девяткова Е. Д., ЖТФ, 27, 461 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Исследование теплопроводности теллуристого свинца.
1769. De Wames R. E., Lehman G. W., Phys. Rev., 135, A170 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Пересмотр динамики решетки белого олова с помощью модифицированной аксиально-симметричной модели.
1770. De Wames R. E., Wölfgram T., Lehman G. W., Phys. Rev., 138, A717 (1965). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки, теплоемкости и факторы Дебая — Уоллера для Be и Zn в рамках модифицированной аксиально-симметричной модели.
1771. De Wames R. E. (см. [3249, 4858]).
1772. De Wette F. W., Physica, 22, 644 (1956).
К теории переходов в некоторых молекулярных кристаллах. II.
1773. De Wette F. W., Nijboer B. R. A., Physica, 24, 1105 (1958). (Гл. 10, § 4.)
Электростатический потенциал в мультипольных решетках.
1774. De Wette F. W., Physica, 25, 1225 (1959). (Гл. 10, § 4.)
Эффекты атомной поляризации в ионных кристаллах.
1775. De Wette F. W., Phys. Rev., 123, 103 (1961). (Гл. 10, § 4.)
Градиенты электрического поля в решетках с точечными ионами и с однородным фоном.
1776. De Wette F. W., Phys. Rev., 135, A287 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Замечание об электронной решетке.
1777. Dexter D. L., Phys. Rev., 83, 435 (1951). (Гл. 3, § 11.)
О спектрах поглощения чистых и окрашенных щелочногалогидных кристаллов.
1778. Dexter D. L., Phys. Rev., 83, 1044 (1951). (Гл. 3, § 11.)
Силы осцилляторов для α - и β -зон в щелочногалогидных кристаллах.

1779. Dexter D. L., *Phys. Rev.*, **101**, 48 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Поглощение света атомами в твердом теле.
1780. Dexter D. L., *Phys. Rev.*, **103**, 107 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние электронов скоплениями вакансий в меди.
1781. Dexter D. L., *Phys. Rev.*, **111**, 119 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Коэффициент преломления и эффект Фарадея в твердых растворах.
1782. Dexter D. L., *Nuovo Cimento, Suppl.*, **7**, 245 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства твердых тел.
1783. Dexter D. L., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 473 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Оптические исследования полупроводников в Рочестерском университете.
1784. Dexter D. L., *Phys. Rev.*, **126**, 1962 (1962). (Гл. 5, § 5.)
Кооперативное оптическое поглощение в твердых телах.
1785. Dexter D. L. (см. [2970, 3979]).
1786. Dexter R. N., Zeiger H. J., Lax B., *Phys. Rev.*, **95**, 557 (1954). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Анизотропия циклотронного резонанса дырок в германии.
1787. Dexter R. N., Lax B., *Phys. Rev.*, **96**, 223 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Эффективные массы дырок в кремнии.
1788. Dexter R. N., Lax B., Kip A. F., Dresselhaus G., *Phys. Rev.*, **96**, 222 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Эффективные массы электронов в кремнии.
1789. Dexter R. N., Lax B., *Phys. Rev.*, **100**, 1216 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронное поглощение в висмуте.
1790. Dexter R. N., Zeiger H. J., Lax B., *Phys. Rev.*, **104**, 637 (1956) (Гл. 3, § 8 и 11.)
Опыты по циклотронному резонансу в кремнии и германии.
1791. Dexter R. N., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 494 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в сульфиде кадмия.
1792. Dexter R. N. (см. [1074, 1703, 4925]).
1793. Dhillon J. S., Shoenberg D., *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **A248**, 1 (1955). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена III. Опыты при полях вплоть до 32 кгс.
1794. Dick V. G., Jr., Overhauser A. W., *Phys. Rev.*, **112**, 90 (1958). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Теория диэлектрических проницаемостей щелочногалогидных кристаллов.
1795. Dick V. G., Jr., Das T. P., *Phys. Rev.*, **127**, 1053 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Деформация решетки в твердых растворах щелочных галогидов.
1796. Dick V. G., Jr., *Phys. Rev.*, **129**, 1583 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Роль обменного заряда в нарушении соотношений Коши у щелочногалогидных кристаллов.
1797. Dimmock J. O., Wheeler R. G., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **23**, 729 (1962).
Неприводимые представления магнитных групп.
1798. Dimmock J. O., Wright G. B., *Phys. Rev.*, **135**, A821 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Структура края зоны в PbS, PbSe и PbTe.
1799. Dingle R. V., *Proc. Roy. Soc.*, **A201**, 545 (1950). (Гл. 5, § 1.)
Электропроводность тонких проволочек.

1800. Dingle R. B., Proc. Roy. Soc., **A211**, 500, 517 (1952); **A212**, 38, 47 (1952); **A216**, 118 (1953); **A219**, 463 (1953). (Гл. 3, § 3 и 9; приложение А, § 3.)
 Некоторые магнитные свойства металлов. I. Общее введение и свойства больших систем электронов. II. Влияние столкновений на магнитное поведение больших систем. III. Диамагнитный резонанс. IV. Свойства малых систем электронов. V. Магнитное поведение цилиндрической системы электронов при всех магнитных полях. VI. Поверхностные поправки к эффекту де Гааза — ван Альфена.
1801. Dingle R. B., Physica, **18**, 985 (1952). (Гл. 5, § 5.)
 Коэффициент отражения металлов в инфракрасном диапазоне.
1802. Dingle R. B., Appl. Sci. Res., **B3**, 69 (1953). (Гл. 5, § 1 и 5.)
 Аномальный скин-эффект и коэффициент отражения металлов. Оценка интегралов, входящих в выражения для поверхностного импеданса.
1803. Dingle R. B., Physica, **10**, 311, 348, 729, 1187 (1953). (Гл. 5, § 1 и 5.)
 Аномальный скин-эффект и коэффициент отражения металлов. I, II. Сравнение теории с опытом для оптических свойств. III. Общая теория низкочастотного и оптического поведения. IV. Теория оптических свойств тонких металлических пленок.
1804. Dingle R. B., Phil. Mag., **46**, 831 (1955).
 Рассеяние электронов и дырок заряженными донорами и акцепторами в полупроводниках.
1805. Dingle R. B., Physica, **22**, 671 (1956).
 Наглядные кинетические методы в теории металлов и полупроводников.
1806. Dingle R. B., Physica, **22**, 683, 1237 (1956). (Гл. 5, § 1 и 5.)
 Аномальный скин-эффект и коэффициент оптического поглощения в полупроводниках. I, II.
1807. Dingle R. B., Physica, **22**, 698 (1956).
 Концепция формальных времен релаксации в теории электронных проводников при низких температурах.
1808. Dingle R. B., Physica, **22**, 701 (1956).
 О влиянии высокочастотных электрических полей и однородных магнитных полей на электропроводность.
1809. Dingle R. B., Physica, **22**, 703 (1956). (Гл. 3, § 8.)
 Общая квазиклассическая теория диамагнитного («циклотронного») резонанса в электронных проводниках.
1810. Dingle R. B., Appl. Sci. Res., **B6**, 225 (1956).
 Интегралы Ферми — Дирака.
1811. Dixon A. E., Woods A. D. B., Brockhouse B. N., Proc. Phys. Soc., **81**, 973 (1963). (Гл. 8, § 1.)
 Колебательный спектр решетки натрия.
1812. Dixon J. R., Phys. Rev., **107**, 374 (1957). (Гл. 3, § 11.)
 Фотоэлектромагнитный эффект в арсениде индия.
1813. Dobbs E. R., Jones G. O., Rep. Progr. Phys., **20**, 516 (1957). (Гл. 8, § 5.)
 Теория и свойства твердого аргона.
1814. Добровольский В. Н., Гриценко Ю. И., ФТТ, **4**, 2760 (1962). (Гл. 2, § 4.)
 Использование холловского тока для исследования рассеяния носителей в полупроводниках.
1815. Догонадзе Р. Р., Чизмаджев Ю. А., ФТТ, **3**, 3712 (1961).
 Электропроводность полярных кристаллов с малой подвижностью носителей. I. Структура энергетического спектра.

1816. Догонадзе Р. Р., Черненко А. А., Чизмаджев Ю. А., ФТТ, **3**, 3720 (1961).
Электропроводность полярных кристаллов с малой подвижностью носителей. II. Вычисление подвижности.
1817. Dolling G., Brockhouse B. N., Phys. Rev., **128**, 1120 (1962). (Гл. 8, § 1 и 5.)
Колебания решетки пиролитического графита.
1818. Dolling G., (см. [1232, 2255]).
1819. Domb G., Sykes M. F., Phil. Mag., **2**, 733 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Удельные теплоемкости сжимаемых решеток и теория плавления.
1820. Domb G., Zucker I. J., Nature, **178**, 484 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Теоретические расчеты для твердого аргона.
1821. Domb G., Sykes M. F., Phil. Mag., **2**, 733 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Расчет постоянных решетки в статистике кристаллов.
1822. Domb G., Maradudin A. A., Montroll E. W., Weiss G. H., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 419, 421 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Спектры колебаний неупорядоченных решеток.
1823. Domb G., Maradudin A. A., Montroll E. W., Phys. Rev., **115**, 18, 24 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Спектры колебаний неупорядоченных решеток. I. Моменты спектров для неупорядоченных линейных цепочек. II. Спектры неупорядоченных одномерных решеток.
1824. Domb G., Adv. Phys., **9**, 149, 245 (1960). (Гл. 8, § 5.)
К теории кооперативных явлений в кристаллах.
1825. Domb G., Isenberg C., Proc. Phys. Soc., **79**, 659 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Расчет термодинамических функций в динамике решетки.
1826. Domb G., Proc. Roy. Soc., **A276**, 418 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Об одномерных колебательных системах.
1827. Domenicali C. A., Otter F. A., Phys. Rev., **95**, 1134 (1954).
Термо-э. д. с. и рассеяние электронов в металлических сплавах.
1828. Domenicali C. A., Phys. Rev., **112**, 1863 (1958).
Термо-э. д. с. и рассеяние электронов в металлических сплавах.
1829. Dopaich S., Proc. Phys. Soc., **73**, 849 (1959).
Решеточное экранирование в полярных полупроводниках.
1830. Dopaich S. (см. [2145]).
1831. Dopovan V., Nature, **168**, 836 (1951). (Гл. 10, § 4.)
Новый расчет энергии связи металлического бериллия.
1832. Dopovan V., Sondheimer E. H., Proc. Phys. Soc., **A66**, 849 (1953). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные эффекты при высоких частотах.
1833. Dopovan V., Proc. Phys. Soc., **A68**, 1026 (1955). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в металлах при высоких частотах.
1834. Dopovan V., March N. H., Proc. Phys. Soc., **B69**, 528 (1956).
Высокочастотная проводимость полупроводников.
1835. Dopovan V., March N. H., Proc. Phys. Soc., **B70**, 883 (1957). Гл. 5, § 5.)
О поглощении на свободных носителях в полупроводниках.
1836. Dopovan V., Webster J., Proc. Phys. Soc., **78**, 120 (1961).
Эффект Фарадея в невырожденных полупроводниках.
1837. Dopovan V., Webster J., Semicond. Conf. Exeter, 1962, p. 643. (Гл. 3, § 11.)
Анизотропный эффект Фарадея в германии *n*-типа.
1838. Dopovan V., Webster J., Proc. Phys. Soc., **79**, 46 (1962); **81**, 90 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Теория эффекта Фарадея в анизотропных полупроводниках. I, II. Приложение к германию *n*-типа.

1839. Donovan B., Webster J., Proc. Phys. Soc., **79**, 1081 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Замечание об эффекте Фарадея в анизотропных полупроводниках.
1840. Дорфман Я. Г., ДАН СССР, **110**, 201 (1956). (Гл. 3, § 8.)
Диамagnetный резонанс в сильно магнитных телах.
1841. Дорфман Я. Г., ЖЭТФ, **35**, 533 (1958).
Диамagnetизм и межатомные связи в молекулах и неметаллических кристаллах.
1842. Дорфман Я. Г., ДАН СССР, **119**, 305 (1958).
Новый метод интерпретации магнитной восприимчивости диамagnetных органических соединений.
1843. Дорфман Я. Г., ДАН СССР, **125**, 765 (1959)
Свойства и состояние атомов металла в некоторых металлоорганических соединениях.
1844. Dorn D., Zs. Naturforsch., **11a**, 383 (1956).
О взаимодействии электронов с дырками в неполярных полупроводниках.
1845. Dorn D., Zs. Naturforsch., **12a**, 18 (1957).
К температурной зависимости подвижности в неполярных полупроводниках.
1846. Dorn D., Zs. Naturforsch., **12a**, 739 (1957).
К обобщенному вариационному методу расчета кинетических коэффициентов металлов и полупроводников.
1847. Douglas A. S., Proc. Camb. Phil. Soc., **52**, 687 (1956). (Гл. 11, § 4.)
Метод улучшения расчетов энергетических уровней для «серий» электронов.
1848. Douglas T. B., Journ. Chem. Phys., **38**, 2461 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Модификация потенциала Борна — Майера в применении к щелочногалогенидным кристаллам.
1849. Dousmanis G. C., Phys. Rev. Lett., **1**, 55 (1958).
Предложение по обнаружению носителей с отрицательной массой при помощи циклотронного резонанса.
1850. Dousmanis G. C., Duncan R. C., Jr., Thomas J. J., Williams R. C., Phys. Rev. Lett., **1**, 404 (1958).
Экспериментальное обнаружение носителей с отрицательной массой.
1851. Dousmanis G. C., Duncan R. C., Jr., Thomas J. J., Williams R. C., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 603. (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс и уровни Ландау при отрицательной массе.
1852. Dousmanis G. C., Phys. Rev., **124**, 1417 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Обращенная природа и смысл уровней Ландау при отрицательной массе.
1853. Dousmanis G. C., Gaughnan B. W., Josephs R. M., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 323. (Гл. 3, § 8.)
Дальнейшие аспекты работы по циклотронному резонансу при отрицательной массе.
1854. Drabble J. R., Wolfe R., Proc. Phys. Soc., **B69**, 1101 (1956). (Гл. 2, § 4.)
Анизотропные гальваномагнитные эффекты в полупроводниках.
1855. Drabble J. R., Groves R. D., Wolfe R., Proc. Phys. Soc., **71**, 430 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в теллуриде висмута *n*-типа.
1856. Drabble J. R., Journ. Electron. Control., **5**, 362 (1958).
Влияние напряжения на термоэлектрические свойства многодолинного полупроводника.

1857. Drabble J. R., Proc. Phys. Soc., 72, 380 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в теллуриде висмута p -типа.
1858. Drabble J. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 428, 442 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в теллуриде висмута.
1859. Drell S. D., Phys. Rev., 83, 838 (1951).
О взаимодействии электронов проводимости с колебаниями решетки.
1860. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Phys. Rev., 92, 827 (1953). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Наблюдение циклотронного резонанса в кристаллах германия.
1861. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Phys. Rev., 95, 568 (1954). (Гл. 3, § 11.)
Спин-орбитальное взаимодействие и эффективные массы дырок в германии.
1862. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Phys. Rev., 98, 368 (1955) (Гл. 3, § 1, 8 и 11.)
Циклотронный резонанс электронов и дырок в кристаллах кремния и германия.
(См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 599.)
1863. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Wagoner G., Phys. Rev., 98, 556 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный и спиновый резонанс в антимониде индия.
1864. Dresselhaus G., Phys. Rev., 100, 580 (1955).
Эффекты спин-орбитальной связи в структуре цинковой обманки.
1865. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., Phys. Rev., 100, 618 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Плазменный резонанс в кристаллах; наблюдения и теория.
1866. Dresselhaus G., Kip A. F., Ku H. Y., Wagoner G., Cris-tian S. M., Phys. Rev., 100, 1218 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в сплавах Ge—Si.
1867. Dresselhaus G., Phys. Rev., 105, 135 (1957). (Гл. 6, § 5.)
Край полосы оптического поглощения в анизотропных кристаллах.
1868. Dresselhaus G., Phys. Rev., 114, 736 (1959).
Обменная энергия электронного газа в сильном магнитном поле.
1869. Dresselhaus G. (см. [1788, 1870, 3533]).
1870. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Phys. Rev., 125, 499 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Межзонные переходы в металлах в магнитном поле.
1871. Dresselhaus M. S. (см. [1411, 1412, 2473]).
1872. Drougard M. E., Huibregtse E. J., IBM Journ. Res. Developm., 1, 318 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Влияние электрического поля на переходы в титанате бария.
1873. DuBois D. F., Ann. Phys., 7, 174 (1959); 8, 24 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Электронное взаимодействие. I. Полевая теория вырожденного электронного газа. II. Свойства плотного электронного газа.
1874. Дудкин Л. Д., ФТТ, 2, 397 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Кристаллохимические особенности полупроводниковых соединений переходных металлов.
1875. Дудкин Л. Д., Вайданич В. И., ФТТ, 2, 404 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Характер электропроводности некоторых соединений переходных металлов с решетками типа CuAl_2 .

1876. Дудкин Л. Д., Вайданн В. И., ФТТ, 2, 1526 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Характер химических связей и электропроводность соединений структурного типа FeS_2 .
1877. Dugdale J. S., MacDonald D. K. C., Phys. Rev., 89, 832 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение твердых тел.
1878. Dugdale J. S., MacDonald D. K. C., Phys. Rev., 96, 57 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Коллебателный ангармонизм и тепловые свойства решетки.
1879. Dugdale J. S., Gupta D., Proc. Roy. Soc., A241, 397 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Влияние давления на электрическое сопротивление меди при низких температурах.
1880. Dugdale J. S., Nuovo Cimento, Suppl., 9, 27 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Уравнение состояния твердого гелия.
1881. Dugdale J. S., Science, 134, 77 (1961).
Электрическое сопротивление при низких температурах.
1882. Dugdale J. S., Gupta D., Proc. Roy. Soc., A270, 186 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Влияние давления на электрическое сопротивление лития, натрия и калия при низких температурах.
1883. Dumke W. P., Phys. Rev., 101, 531 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Теория потенциала деформации для Ge n -типа.
1884. Dumke W. P., Phys. Rev., 105, 139 (1957).
Спонтанная излучательная рекомбинация в полупроводниках.
1885. Dumke W. P., Phys. Rev., 108, 1419 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Непрямые переходы в центре зоны Бриллюэна с приложением к InSb и возможное новое явление.
1886. Dumke W. P., Miller P. B., Haering R. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 501 (1962).
Теория туннелирования с участием поляризационных фононов.
1887. Dumke W. P. (см. [1262]).
1888. Duncan R. C., Jr., Rosenblum B., Phys. Rev., 125, 484 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Теория циклотронного резонансного поглощения дырками с отрицательной массой в германии.
1889. Duncan R. C., Jr. (см. [1850, 4143]).
1890. Dupre F. K., Hutner R. A., Rittner E. S., Journ. Chem. Phys., 18, 379 (1950).
О работе поляризации в ионных кристаллах типа NaCl. III. Численные результаты для единичного заряда в жесткой решетке.
1891. Dupre F. K. (см. [2640, 2641, 4099]).
1892. Dupree T. H., App. Phys., 15, 63 (1961).
Рассеяние электронов в кристаллической решетке.
1893. Duprey V., Proc. Phys. Soc., 78, 1372 (1961).
Электронная проводимость полярных полупроводников.
1894. Dutta A. K., Physica, 24, 343 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Характеристики свободных электронов в графите, полученные из изучения его магнитных и других свойств.
1895. Дыхне А. М., Матыгина З. А., Смирнов А. А., Физ. мет. и металловед., 5, 220 (1957).
Теория остаточного электросопротивления многокомпонентных упорядочивающихся сплавов.

1896. Дыкман И. М., Толпыго Е. И., ФТТ, 4, 896 (1962). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление и эффект Холла в полупроводниках с нагретыми электронами и в плазме.
1897. Дыкман И. М., Томчук П. М., ФТТ, 4, 3551 (1962).
Электропроводимость полярных полупроводников при учете межэлектронного взаимодействия.
1898. Дыкман И. М. (см. [1733]).
1899. Дзялошинский И. Е., ЖЭТФ, 30, 1152 (1956). (Приложение 5, § 7.)
Об учете запаздывания во взаимодействии нейтральных атомов.
1900. Дзялошинский И. Е., Лифшиц Е. М., Пятаевский Л. П., Adv. Phys., 10, 165 (1961). (Приложение 5, § 7.)
Общая теория вандерваальсовых сил.
1901. Дзюб И. П., ДАН СССР, 130, 1241 (1960).
О применении метода функций Грина в теории твердого тела.
1902. Дзюб И. П., Лубченко А. Ф., ФТТ, 3, 3602 (1961). (Гл. 5, § 5.)
Резонансное рассеяние света примесными центрами твердого тела.
1903. Eagles D. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 16, 76 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Оптическое поглощение и рекомбинационное излучение в полупроводниках, обусловленное переходами между водородоподобными акцепторными примесными уровнями и зоной проводимости.
1904. Eastabrook J. N., Phil. Mag., 2, 1415 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Удельная теплоемкость твердых тел при высоких температурах.
1905. Eastabrook J. N., Phil. Mag., 2, 1421 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение твердых тел при высоких температурах.
1906. Easterling V. J., Bohm H. V., Phys. Rev., 125, 812 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Магнетоакустические измерения в Ag при 230 Мгц и 42° К.
1907. Easterling V. J. (см. [1288]).
1908. Eckstein S. G., Phys. Rev., 131, 1087 (1963).
Резонансное усиление звука электронами проводимости.
1909. Eckstein S. G. (см. [1909]).
1910. Eckstein Y., Ketterson J. B., Eckstein S. G., Phys. Rev., 135, A740 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Наблюдение магнетоакустических геометрических резонансов в магнитном поле произвольного направления.
1911. Eckstein Y., Ketterson J. B., Phys. Rev., 137, A1777 (1965). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Шубникова — де Гааза в висмуте.
1912. Eckstein Y. (см. [2859]).
1913. Eden R. J., Francis N. C., Phys. Rev., 97, 1366 (1955). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Теория ядерных моделей.
1914. Eden R. J., Phys. Rev., 99, 1418 (1955). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Ядерное насыщение; обобщенный метод Хартри — Фока.
1915. Edmiston C., Ruedenberg K., Rev. Mod. Phys., 35, 457 (1963).
Локализованные атомные и молекулярные орбиты.
1916. Edwards A. L., Slykhouse T. E., Drickamer H. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 11, 140 (1959).
Влияние давления на структуры цинковой обманки и вюрцита.
1917. Edwards S. F., Phil. Mag., 3, 302 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Корреляции плотности заряда в классической плазме.
1918. Edwards S. F., Phil. Mag., 3, 1020 (1958).
Новый метод вычисления электропроводности металлов.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1960, стр. 240.)

1919. Edwards S. F., Proc. Phys. Soc., **72**, 685 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Коллективная трактовка ферми-газа. I.
1920. Edwards S. F., Гуляев Ю. В., Proc. Phys. Soc., **83**, 495 (1964).
Плотность состояний в сильно легированном полупроводнике.
1921. Edwards S. F. (см [1162]).
1922. Эфрос А. Л., ФТТ, **3**, 2065 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Приближенный расчет колебательного спектра кристаллов теллуристого и сернистого свинца.
1923. Эфрос А. Л., ФТТ, **3**, 2848 (1961). (Гл. 3, § 10.)
Осцилляции поперечной электропроводности в сильном магнитном поле, обусловленные рассеянием на оптических фононах в металлах и полуметаллах.
1924. Эфрос А. Л. (см. [2412, 2421, 3607, 4268]).
1925. Ehrenreich H., Overhauser A. W., Phys. Rev., **104**, 331 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние дырок на фононах в германии.
1926. Ehrenreich H., Overhauser A. W., Phys. Rev., **104**, 649 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Подвижность дырок в германии с учетом рассеяния на фононах.
1927. Ehrenreich H., Journ. Phys. Chem. Solids, **2**, 131 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние электронов в InSb.
1928. Ehrenreich H., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 130 (1959).
Эффекты экранирования в полярных полупроводниках.
1929. Ehrenreich H., Journ. Phys. Chem. Solids, **9**, 129 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Перенос электронов в собственном InSb.
1930. Ehrenreich H., Cohen M. H., Phys. Rev., **115**, 786 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Метод самосогласованного поля в многоэлектронной задаче.
1931. Ehrenreich H., Journ. Phys. Chem. Solids, **12**, 97 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Подвижность электронов в арсениде-фосфиде индия.
1932. Ehrenreich H., Phys. Rev., **120**, 1951 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и перенос электронов в GaAs.
1933. Ehrenreich H., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 67. (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и кинетические свойства GaAs.
1934. Ehrenreich H., Journ. Appl. Phys., **32** (Suppl.), 2155 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и кинетические свойства некоторых соединений типа III—V.
1935. Ehrenreich H., Philipp H. R., Phys. Rev., **128**, 1622 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11; гл. 5, § 4.)
Оптические свойства Ag и Cu.
1936. Ehrenreich H., Philipp H. R., Phillips J. C., Phys. Rev. Lett., **8**, 59 (1962). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Межзонные переходы в полупроводниках IV группы, III—V и II—VI групп.
1937. Ehrenreich H., Philipp H. R., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 367. (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства полупроводников в ультрафиолетовой области.
1938. Ehrenreich H., Philipp H. R., Olechna D. J., Phys. Rev., **131**, 2469 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства и поверхность Ферми никеля.
1939. Ehrenreich H., Philipp H. R., Segall B., Phys. Rev., **132**, 1918 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства алюминия.

1940. Ehrenreich H. (см. [1640, 3882—3884, 4861]).
1941. Ehrlich A. C., Dreesen J. A., Pugh E. M., Phys. Rev., 133, A407 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла и магнетосопротивление в некоторых сплавах никель — медь — железо.
1942. Eisenhauer C. M., Pelah I., Hughes D. J., Palevsky H., Phys. Rev., 109, 1046 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Исследование колебаний решетки ванадия с помощью рассеяния нейтронов.
1943. Eisenhauer C. M. (см. [2248, 3862]).
1944. Elliott R. J., Phil. Mag., 1, 298 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Колебания искаженной решетки.
1945. Elliott R. J., McLean T. P., Macfarlane G. G., Proc. Phys. Soc., 72, 553 (1958).
Теория влияния магнитного поля на край поглощения в полупроводниках.
1946. Elliott R. J., Loudon R., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 421 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Теория тонкой структуры края поглощения в полупроводниках.
1947. Elliott R. J., Loudon R., Journ. Phys. Chem. Solids, 15, 146 (1960).
Трактовка процессов рассеяния в кристаллах с помощью теории групп.
1948. Elliott R. J., Loudon R., Journ. Phys. Chem. Solids, 15, 196 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Теория края поглощения в полупроводниках в сильном магнитном поле.
1949. Elliott R. J., Wedgwood F. A., Proc. Phys. Soc., 81, 846 (1963).
Теория сопротивления редкоземельных металлов.
1950. Elliott R. J., Brit. Journ. Appl. Phys., 14, 770 (1963).
Эффекты в неметаллах в сильных магнитных полях.
1951. Elliott R. J., Taylor D. W., Proc. Phys. Soc., 83, 189 (1964).
Теория корреляции и рассеяния колебаний решетки на дефектах в методе двухвременных функций Грина.
1952. Elliott R. J. (см. [1709, 1710]).
1953. Ellis S. G., Herman F., Loebner E. E., Merz W. J., Struck C. W., White J. G., Phys. Rev., 109, 1860 (1958). (Гл. 3, § 11)
Фото-э. д. с., большие, чем ширина запрещенной зоны, в кристаллах сульфида цинка.
1954. Emersleben O., Zs. Phys., 127, 588 (1950). (Гл. 10, § 4.)
Электростатическая энергия плоской нейтральной решетки, в частности квадратной с чередующимися зарядами.
1955. Emersleben O., Zs. Angew. Math. Mech., 30, 252 (1950). (Гл. 10, § 4.)
О расчете энергии решетки конечных кристаллических образцов.
1956. Emersleben O., Math. Nachr., 3, 373 (1950). (Гл. 10, § 4.)
Собственный потенциал конечного ряда эквидистантно расположенных точек.
1957. Emersleben O., Math. Nachr., 4, 468 (1951). (Гл. 10, § 4.)
О сходимости рядов эпштейновских ζ -функций.
1958. Emersleben O., Math. Nachr., 6, 155 (1951). (Гл. 10, § 4.)
Собственный потенциал конечного ряда нейтральных эквидистантных пар точек.
1959. Emersleben O., Zs. Phys. Chem., 199, 170 (1952). (Гл. 10, § 4.)
Электростатическая энергия решетки конечных образцов гетерополярных кристаллов.

1960. Emersleben O., Zs. Phys. Chem., **200**, 1 (1952).
О зависимости теплоты плавления ионного кристалла от его зернистости.
1961. Emersleben O., Math. Nachr., **9**, 221 (1953). (Гл. 10, § 4.)
Об остаточном члене разложения энергии нейтральных ионных решеток.
1962. Emersleben O., Math. Nachr., **10**, 135 (1953). (Гл. 10, § 4.)
Электростатический собственный потенциал эквидистантных зарядов, расположенных на замкнутой линии.
1963. Emersleben O., Zs. Phys. Chem., **204**, 121 (1955). (Гл. 10, § 4.)
Как воздействует скопление одноименных ионов на поверхности нейтральных ионных решеток на коэффициенты разложения энергии решетки? I. Общие положения.
1964. Emtage P. R., Phys. Rev., **138**, A452 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура антимонида платины.
1965. Enderby J. E., Proc. Phys. Soc., **81**, 772 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в жидких металлах.
1966. Endo H., Suekane S., Canad. Journ. Phys., **41**, 1397 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Влияние электронной корреляции на электрическое сопротивление жидких металлов.
1967. Engeler W. E., Phys. Rev., **129**, 1509 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Магнетопоглощение и ширина запрещенной зоны в Bi.
1968. Engelmann F., Zs. Phys., **145**, 430 (1956).
Исследования по теории энергетических состояний электронов в идеальных и неидеальных кристаллических решетках.
1969. Engelsberg S., Phys. Rev., **126**, 1262 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Энергетические потери и коллективные возбуждения в кристаллах.
1970. Engelsberg S., Schrieffer J. R., Phys. Rev., **131**, 993 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Система взаимодействующих электронов и фононов.
1971. Engelsberg S., Varga B. B., Phys. Rev., **136**, A1582 (1964).
Одномерная электрон-фононная модель.
1972. Englert F., Journ. Phys. Chem. Solids, **11**, 78 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Поведение малой квантовой системы в слабо диссипирующей среде; некоторые приложения к кулоновским взаимодействиям.
1973. Englert F., Brout R., Phys. Rev., **120**, 1085 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Диэлектрическая формулировка квантовой статистики взаимодействующих частиц.
1974. Engلمان R., Sondheimer E. H., Proc. Phys. Soc., **B69**, 449 (1956).
Электропроводность анизотропных тонких пленок.
1975. Engلمان R., Proc. Phys. Soc., **72**, 191 (1958).
Теория переноса температурных волн в изоляторах.
- 1976.ENZ C. P., Nuovo Cimento, Suppl., **6**, 1224 (1957).
Магнитная восприимчивость электронов в периодических полях.
1977. Epstein S., Juretschke H. J., Phys. Rev., **129**, 1148 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты и зонная структура чистых и легированных оловом монокристаллов сурьмы.
1978. Ережепов М. Е., Пекар С. И., ФТТ, **5**, 1297 (1963).
Теория электропроводности полупроводников с учетом поля заряженных примесных центров.
1979. Eriksson L., Beckman O., Hornfeldt S., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 1339 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми в сурьме, полученная из магнетоакустических резонансов.

1980. Erma V. A., *Ann. Phys.*, **20**, 345 (1957). (Гл. 10, § 1.)
Об уравнении Томаса — Ферми при высоких температурах.
1981. Ern V., Switendick A. C., *Phys. Rev.*, **137**, A1927 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура TiC, TiN и TiO.
1982. Eros S., Reitz J. R., *Journ. Appl. Phys.*, **29**, 683 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные, измеренные с помощью ультразвукового импульсного метода эхо.
1983. Eros S., Smith C. S., *Acta Met.*, **9**, 14 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Низкотемпературные упругие постоянные сплавов магния.
1984. Esaki L., *Phys. Rev. Lett.*, **8**, 4 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Новое явление в магнетосопротивлении висмута при низких температурах.
1985. Eshelby J. D., *Proc. Phys. Soc.*, **B69**, 1013 (1956).
Сверхзвуковые дислокации и дислокации в диспергирующих средах.
1986. Eshelby J. D., Newey C. W., Pratt P. L., Lidiard A. B., *Phil. Mag.*, **3**, 75 (1958). (Гл. 10, § 4.)
Заряженные дислокации и прочность ионных кристаллов.
1987. Estermann I., Foner A., *Phys. Rev.*, **79**, 365 (1950). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление образцов германия между 20 и 300° K.
1988. Estermann I. (см. [2125]).
1989. Everett G. E., *Phys. Rev.*, **128**, 2564 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Измерения циклотронного резонанса в висмуте.
1990. Евсеев З. Я., *ЖЭТФ*, **31**, 331 (1956).
Влияние поперечного магнитного поля на теплопроводность металлов.
1991. Evtuhov V., *Phys. Rev.*, **125**, 1869 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Валентные зоны германия и кремния во внешнем магнитном поле.
1992. Evtuhov V., *Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962*, p. 590.
(Гл. 3, § 8.)
Уровни Ландау для валентных зон полупроводников типа алмаза.
1993. Ewald A. W., Tufte O. N., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 523 (1959).
(Гл. 3, § 11.)
Электронные свойства монокристаллов серого олова.
1994. Ewald A. W. (см. [2565, 3308]).
1995. Ewald P. P., Juretschke H., в книге «Structure and Properties of Solid Surfaces», Chicago, 1953, p. 82. (Гл. 10, § 4.)
Атомная теория поверхностной энергии.
1996. Ewald P. P., *Acta Cryst.*, **11**, 888 (1958).
Групповая скорость и фазовая скорость в рентгеновской кристаллооптике.
1997. Euges L., *Phys. Rev.*, **130**, 2218 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Обменная энергия электронного газа в периодическом поле.
1998. Факидов И. Г., Завадский Э. А., *ЖЭТФ*, **34**, 1036 (1958).
(Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции электрического сопротивления германия *n*-типа в сильных импульсных магнитных полях.
1999. Факидов И. Г. (см. [4921]).
2000. Falicov L. M., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 39.
(Гл. 11, § 7.)
Скорость и эффективный заряд частиц вблизи поверхности Ферми.
2001. Falicov L. M., Heine V., *Adv. Phys.*, **10**, 57 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Многочастичная теория электронов в металле, или действительно ли металл имеет поверхность Ферми?

2002. Falicov L. M., Golip S., Phys. Rev., **137**, A871 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура мышьяка. I. Метод псевдопотенциала.
2003. Falicov L. M., Sievert P. R., Phys. Rev., **138**, A88 (1965). (Гл. 2, § 4.)
Теория гальваномагнитных эффектов в металлах с магнитным пробоем; квазиклассическое приближение.
2004. Falicov L. M. (см. [1601, 2250, 4012]).
2005. Falk D. S., Phys. Rev., **118**, 105 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Влияние решетки на диэлектрические свойства электронного газа.
2006. Фальковский Л. А., ЖЭТФ, **44**, 1935 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Теория электронного спектра в металлах типа висмута в магнитном поле.
2007. Фал Н. У., Solid State Phys., **1**, 283 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Валентные полупроводники, германий и кремний.
[См. перевод: УФН, **64**, 733 (1958); **65**, 111 (1958).]
2008. Фал Н. У., Rep. Progr. Phys., **19**, 107 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Инфракрасное поглощение в полупроводниках.
2009. Фал Н. У., Spitzer W., Collins R. J., Phys. Rev., **101**, 566 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение в германии *n*-типа.
2010. Фал Н. У., Nuovo Cimento, Suppl., **7**, 661 (1958).
Свойства полупроводников.
2011. Фал Н. У., Fisher P., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 270 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Спектры поглощения доноров V группы в германии.
2012. Фал Н. У. (см. [1161, 3016, 4439, 4441]).
2013. Фало У., Phys. Rev., **103**, 1202 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Теория электромагнитных взаимодействий в конденсированных веществах.
2014. Фало У., Phys. Rev., **118**, 451 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные моды колебаний решетки со многими резонансами и дипольной связью.
2015. Fatuzzo E., Proc. Phys. Soc., **84**, 709 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Полевая зависимость полос поглощения сегнетозлектриков в далекой инфракрасной области.
2016. Faulkner J. S., Phys. Rev., **135**, A124 (1964).
Электронные состояния кристалла Кронига — Пенни со случайными положениями атомов.
2017. Fawcett E., Phys. Rev., **103**, 1582 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в олове и меди.
2018. Fawcett E., Phys. Rev. Lett., **3**, 139 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в алюминии.
2019. Fawcett E., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 166. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в алюминии.
2020. Fawcett E., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 197. (Гл. 3, § 11.)
Аномальный скин-эффект в алюминии.
2021. Fawcett E., Journ. Phys. Chem. Solids, **18**, 320 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Площади поверхности Ферми в магнии, цинке и кадмии.
2022. Fawcett E., Phys. Rev. Lett., **6**, 534 (1961). (Гл. 3, § 10.)
Топология поверхности Ферми четновалентных металлов по данным об анизотропии их магнетосопротивлений.
2023. Fawcett E., Phys. Rev. Lett., **7**, 370 (1961). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление переходных металлов в пределе сильного поля.

2024. Fawcett E., Walsh W. M., Jr., Phys. Rev. Lett., **8**, 476 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в вольфраме.
2025. Fawcett E., Reed W. A., Phys. Rev. Lett., **9**, 336 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Много связность поверхности Ферми никеля по данным об анизотропии его магнетосопротивления.
2026. Fawcett E., Griffiths D., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 1631 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Площади поверхности Ферми в хrome, молибдене и вольфраме.
2027. Fawcett E., Phys. Rev., **128**, 154 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление молибдена и вольфрама.
2028. Fawcett E., Reed W. A., Phys. Rev., **131**, 2463 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Влияние компенсации на гальваномагнитные свойства немагнитных и ферромагнитных металлов.
2029. Fawcett E., Reed W. A., Phys. Rev., **134**, A723 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление молибдена и вольфрама в сильных полях.
2030. Fawcett E., Adv. Phys., **13**, 139 (1964). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные свойства металлов в сильных полях.
2031. Fawcett E. (см. [4079, 4794]).
2032. Федоров Ф. И., Оптика и спектроскопия, **5**, 450 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Оптика поглощающих кристаллов. IV. Классификация.
2033. Фейнберг Е. Л., ЖЭТФ, **34**, 1125 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Коллективные колебания электронов в кристалле.
2034. Фейнберг Е. Л. (см. [4391]).
2035. Ferrigeira L. G., Phys. Rev., **137**, A1601 (1965). (Гл. 2, § 3; гл. 3, § 11.)
Потенциалы деформации в теллуриде свинца.
2036. Ferrrell R. A., Phys. Rev., **101**, 554 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Угловая зависимость характеристических энергетических потерь электронов, проходящих через металлическую фольгу.
2037. Ferrrell R. A., Phys. Rev., **107**, 450 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Характеристические энергетические потери электронов, проходящих через металлическую фольгу. II. Дисперсионное уравнение и коротковолновая граница плазменных колебаний.
2038. Ferrrell R. A., Quipp J., Phys. Rev., **108**, 570 (1957). (Гл. 10, § 7.)
Характеристические энергетические потери электронов, проходящих через металлическую фольгу; импульсная экситонная модель плазменных колебаний.
2039. Ferrrell R. A., Phys. Rev., **111**, 1214 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Предсказание излучения плазменными колебаниями в металлических пленках.
2040. Ferrrell R. A., Phys. Rev. Lett., **1**, 443 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Точный критерий правильности различных аппроксимаций в теории корреляционной энергии электронного газа.
2041. Ferrrell R. A., Stern E. A., Amer. Journ. Phys., **30**, 810 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Плазменный резонанс в электродинамике металлических пленок.
2042. Ferrrell R. A. (см. [2281, 4021, 4022, 4473]).
2043. Feupman R. P., Metropolis N., Teller E., Phys. Rev., **75**, 1561 (1949). (Гл. 10, § 4.)
Уравнения состояния элементов, основанные на обобщенной теории Томаса — Ферми.
2044. Fielding P., Fischer G., Mooser E., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 434 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Полупроводники типа $A^{III}B^{VI}$.

2045. Fieschi R., Nuovo Cimento, Suppl., 2, 1168 (1955). (Гл. 2, § 4.)
Термодинамическая теория гальваномагнитных и термомагнитных явлений.
2046. Fieschi R., Nuovo Cimento, 6, 1225 (1957).
О термодинамической теории теплопроводности диэлектриков в электрических полях.
2047. Фикс В. Б., ФТТ, 4, 1863 (1962).
О влиянии магнитного поля на ионную проводимость в полупроводниках.
2048. Фирсов Ю. А., ЖЭТФ, 32, 1350 (1957). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о структуре электроного спектра в решетках типа теллура.
2049. Фирсов Ю. А., ЖТФ, 27, 2212 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Магнитная восприимчивость в полупроводниках типа теллура.
2050. Фирсов Ю. А., ЖТФ, 28, 1129 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Значение постоянной Холла в полупроводниках при сильных магнитных полях.
2051. Фирсов Ю. А., ФТТ, 1, 44 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в полупроводниках со сложными эквивалентными поверхностями.
2052. Фирсов Ю. А., ФТТ, 5, 2149 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Теория эффекта Холла в полупроводниках с малой подвижностью.
2053. Фирсов Ю. А. (см. [2419, 2421, 3034]).
2054. Fischbeck H. J., Phys. Status Solidi, 3, 1082, 2399 (1963).
Свойства симметрии блоховских электронов в магнитном поле.
2055. Fischer G., MacDonald D. K. C., Canad. Journ. Phys., 36, 527 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление и полевая зависимость эффекта Холла в антимониде индия.
2056. Fischer G., Hedgcock F. T., Journ. Phys. Chem. Solids, 17, 246 (1960). (Гл. 2, § 4, гл. 3, § 11.)
Магнитная восприимчивость и гальваномагнитные эффекты в чисто дырочном теллуре.
2057. Fischer G., Brebner J. L., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 1363 (1962). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Электрическое сопротивление и эффект Холла в монокристаллах GaTe и GaSe.
2058. Fischer G. (см. [2044]).
2059. Fischer-Hjalmaris I., Grabe V., Journ. Chem. Phys., 22, 1259 (1954). (Гл. 5, § 5.)
Теоретическое исследование окрашенных окислов щелочных металлов.
2060. Fischer-Hjalmaris I., Tetrahedron, 17, 235 (1962).
О природе связи между атомами углерода.
2061. Fisher E., Phys. Rev., 73, 36 (1948). (Гл. 3, § 11.)
Энергетические уровни хлористого натрия.
2062. Fisher E., Journ. Chem. Phys., 19, 1284 (1951). (Гл. 10, § 4.)
Кулоновская энергия сложных кристаллов.
2063. Фишер И. З., ЖТФ, 27, 638 (1957). (Гл. VI, § 7.)
Эффекты экранирования кулоновского поля свободными зарядами в металлах и полупроводниках.
2064. Фишер И. З., ЖЭТФ, 33, 262 (1957).
К полярной модели металла.
2065. Фишер И. З., Крылович В. И., ЖТФ, 27, 1289 (1957).
Водородоподобная система с частично экранированным кулоновским потенциалом.

2066. Фишер И. З., ФТТ, 1, 192 (1959).
О примесной проводимости в жидких и аморфных полупроводниках.
2067. Фишер И. З., Phys. Rev., 125, 492 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Преобразование частица — дырка на поверхности Ферми; операция симметрии для коллективных возбуждений.
2068. Fisher P., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 1346 (1962). (Гл. 5, § 5.)
Влияние химического расщепления на серию Лаймана для сурьмы в германии.
2069. Fisher P. (см. [2011]).
2070. Fletcher G. C., Phil. Mag., 2, 639 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение твердых тел.
2071. Fletcher G. C., Australian Journ. Phys., 12, 237 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение твердых тел.
2072. Fletcher J. G., Larson D. C., Phys. Rev., 111, 455 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Влияние взаимодействия между электронами на металлические свойства.
2073. Fletcher R. C., Yager W. A., Merritt F. R., Phys. Rev., 100, 747 (1955). (Гл. 3, § 8.)
Наблюдение квантовых эффектов в циклотронном резонансе.
2074. Flubacher P., Leadbetter A. J., Morrison J. A., Stoecheff B. P., Journ. Phys. Chem. Solids, 12, 53 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Низкотемпературная теплоемкость и спектры Рамана и Бриллюэна для стекловидного кремнезема.
2075. Fochs P. D., Proc. Phys. Soc., B69, 70 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Измерение ширины запрещенной зоны полупроводников по их диффузным спектрам отражения.
2076. Фок М. В., ФТТ, 5, 1489 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Ширина запрещенной полосы и эффективный заряд иона в кристаллической решетке ZnS.
2077. Фомин Н. В., ЖТФ, 28, 783 (1958).
Сильные поля в теории электропроводности полупроводников.
2078. Фомин Н. В., ФТТ, 2, 605 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Поглощение инфракрасного излучения полупроводниками в электрическом поле.
2079. Фомин Н. В., ФТТ, 3, 1883 (1961).
Теория экранирования в случае многодолинного энергетического спектра электронов.
2080. Foner S., Pugh E. M., Phys. Rev., 91, 20 (1953). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в сплавах кобальта с никелем и в железе армо.
2081. Foner S., Phys. Rev., 99, 1079 (1955). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в пермаллое
2082. Foner S., Phys. Rev., 101, 1648 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла и магнитные свойства железа армо.
2083. Foner S., Phys. Rev., 107, 1513 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в титане, ванадии, хrome и магнии.
2084. Foner S., Allison F. E., Pugh E. M., Phys. Rev., 109, 1129 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в Ni_3Mn и Fe—Co как функция упорядочения.
2085. Foner S. (см. [2861, 4840, 4970]).
2086. Foreman A. J. E., Lomer W. M., Proc. Phys. Soc., B70, 1143 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки и гармонические силы в твердых телах.

2087. Foreman A. J. E., Proc. Phys. Soc., **79**, 1124 (1962) (Гл. 8, § 5.)
Ангармоническая удельная теплоемкость твердых тел.
2088. Fögrsvoll K., Holwech I., Phil. Mag., **9**, 435 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные размерные эффекты в алюминиевых пленках.
2089. Fögrsvoll K., Holwech I., Phil. Mag., **10**, 181 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные размерные эффекты в индиевых пленках.
2090. Fögrsvoll K., Holwech I., Phil. Mag., **10**, 921 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Зондгеймеровские осцилляции в эффекте Холла в алюминии.
2091. Fowler H. A., Farnsworth H. E., Phys. Rev., **111**, 103 (1958).
Отражение очень медленных электронов.
2092. Fox D., Schnepf O., Journ. Chem. Phys., **23**, 767 (1955). (Гл. 5, § 5.)
Теория нижних возбужденных электронных состояний кристалла бензола.
2093. Fox D., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 439, 442 (1959).
Проводящие состояния в органических молекулярных кристаллах.
2094. Фрадкин Е. С., ЖЭТФ, **36**, 1533 (1959). (Гл. 10, § 1.)
Некоторое уточнение модели Томаса — Ферми на малых расстояниях.
2095. Frank F. C., Phil. Mag., **41**, 1287 (1950). (Гл. 10, § 4.)
Решеточные суммы для ионных кристаллов.
2096. Frank H. S., Journ. Chem. Phys., **23**, 2023 (1955).
Термодинамика жидкого вещества в электростатическом поле.
2097. Frank V., Appl. Sci. Res., **B6**, 379 (1957); **B7**, 41 (1958). (Гл. 2, § 4, гл. 3, § 11.)
Постоянная Холла технически чистых металлов от 80 до 800° К. I. Результаты для Cu, Ag, Au, Pd и Pt. II. Результаты для Zr, W, Mo, Ta, Nb и Al. Обзор результатов для 4d- и 5d-переходных групп металлов.
2098. Franklin A. D., Progr. Dielectrics, 1959, p. 171. (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектричество монокристаллов титаната бария.
2099. Fraу S. J., Johnson F. A., Jones R. H., Proc. Phys. Soc., **76**, 939 (1960). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5.)
Решеточные полосы поглощения в антимониде индия.
2100. Fraу S. J. (см. [1586]).
2101. Frazer В. С., Pepinsky R., Acta Cryst., **6**, 273 (1953) (Гл. 8, § 5.)
Рентгеновский анализ сегнетоэлектрического перехода в KN_2PO_4 .
2102. Frazer В. С., Danner H. R., Pepinsky R., Phys. Rev., **100**, 745 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Нейтроннографический анализ тетрагональных монокристаллов BaTiO_3 .
2103. Frazer В. С. (см. [4287]).
2104. Frederikse H. P. R., Blunt R. F., Proc. Inst. Rad., Eng., **43**, 1828 (1955).
Фотоэффект в интерметаллических соединениях.
2105. Friderikse H. P. R., Mielczarek E. V., Phys. Rev., **99**, 1889 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Термо-э. д. с. антимонида индия.
2106. Friderikse H. P. R., Hosler W. R., Canad. Journ. Phys., **34**, 1377 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в InSb n -типа при 4,2° К.
2107. Friderikse H. P. R., Hosler W. R., Phys. Rev., **108**, 1136 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в антимониде индия n -типа.
2108. Friderikse H. P. R., Hosler W. R., Phys. Rev., **108**, 1146 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в антимониде индия p -типа.

2109. Frederikse H. P. R., Hosler W. R., Phys. Rev., 110, 880 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Осцилляции гальваномагнитных коэффициентов в арсениде индия *p*-типа.
2110. Frederikse H. P. R., Thurber W. R., Hosler W. R., Phys. Rev., 134, A442 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Электронные явления переноса в титанате стронция.
2111. Frederikse H. P. R. (см. [2756]).
2112. Fredkin D. R., Werthamer N. R., Phys. Rev., 138, A1527 (1965). (Гл. 11, § 7.)
К динамике решетки на основе квантовой теории многих тел. I. Зависящее от времени приближение Хартри.
2113. Fredkin D. R. (см. [4549, 4803]).
2114. Freedman S. J., Juretschke H. J., Phys. Rev., 124, 1379 (1961). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты и зонная структура сурьмы.
2115. Freeman A. J., Acta Cryst., 12, 261 (1959). (Гл. 6, § 2.)
Атомные факторы для сферических и несферических распределений заряда.
2116. Freeman A. J., Wood J. H., Acta Cryst., 12, 271 (1959). (Гл. 6, § 2.)
Атомный фактор для железа.
2117. Freeman A. J., Acta Cryst., 12, 274 (1959). (Гл. 1, § 5; гл. 6, § 2.)
Исследование комптоновского рассеяния рентгеновских лучей: Ne, Cu⁺, Cu и Zn⁺².
2118. Freeman A. J., Acta Cryst., 12, 929 (1959). (Гл. 6, § 2.)
Некогерентное рассеяние рентгеновских лучей в случае несферических распределений заряда: N, N⁻, O⁻, O, O⁺, O⁺², O⁺³, F, F⁻, Si⁺⁴, Si⁺³, Si и Ge.
2119. Freeman A. J., Acta Cryst., 13, 190 (1960). (Гл. 1, § 5; гл. 6, § 2.)
Исследование комптоновского рассеяния рентгеновских лучей. II. Li, Li⁺, Be, Na, Na⁺, Al⁺, Al⁺³, K⁺, Cl⁻, Ca, Ca⁺ и Ca⁺².
2120. Freeman A. J., Acta Cryst., 13, 618 (1960). (Гл. 6, § 2.)
Некогерентное рассеяние рентгеновских лучей в случае несферических распределений заряда. II. Ti⁺, V⁺², Mn⁺², Mn и Fe.
2121. Freeman A. J., Watson R. E., Phys. Rev., 118, 1168 (1960). (Гл. 6, § 2.)
Влияние кристаллических полей на плотности заряда и магнитные формфакторы.
2122. Freeman A. J., Watson R. E., Acta Cryst., 14, 231 (1961). (Гл. 6, § 2.)
Атомные факторы по методу Хартри — Фока для нейтральных атомов группы железа.
2123. Freeman A. J. (см. [1271]).
2124. Frei V., Matyas M., Velicky B., Zavetova M., Skacha J., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 766. (Гл. 3, § 11.)
Исследование зонной структуры CdSb.
2125. Freiberg S. A., Estermann I., Goldman J. E., Phys. Rev., 85, 375 (1952). (Гл. 1, § 4.)
Электронная теплоемкость хрома и магния.
2126. Freiberg S. A. (см. [2435]).
2127. Friedel J., Proc. Phys. Soc., B85, 769 (1952). (Гл. 5, § 5; приложение 5, § 7.)
Поглощение света благородными металлами и его связь с вандерваальсовым вкладом в энергию связи.

2128. Friedel J., *Adv. Phys.*, **3**, 446 (1954). (Приложение 2, § 1.)
Электронная структура первичных твердых растворов металлов.
2129. Friedel J., *Proc. 10th Solvay Conf., Brussels, 1954*, p. 183. (Приложение 2, § 1.)
Первичные твердые растворы металлов.
2130. Friedel J., *Canad. Journ. Phys.*, **34**, 1190 (1956). (Приложение 2, § 1.)
О некоторых электрических и магнитных свойствах металлических твердых растворов.
2131. Friedel J., Lenglard P., Lemaire G., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 781 (1964).
Изучение спин-орбитальной связи в переходных металлах. Платина.
2132. Friedel J. (см. [1026, 1154]).
2133. Friedmann L., *Phys. Rev.*, **133**, A1668 (1964).
Явления переноса в органических полупроводниках.
2134. Fritzsche H., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **6**, 69 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Сопротивление и постоянная Холла в германии, легированном сурьмой при низких температурах.
2135. Fritzsche H., *Phys. Rev.*, **120**, 1120 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Долинноорбитальное расщепление уровней сурьмы в германии.
2136. Fröhlich H., *Proc. Roy. Soc.*, **A188**, 521 (1947).
К теории диэлектрического пробоя в твердых телах.
2137. Fröhlich H., *Research*, **3**, 202 (1950).
Электроны проводимости в неметаллических твердых телах.
2138. Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S., *Phil. Mag.*, **41**, 221 (1950).
Свойства медленных электронов в полярных материалах.
2139. Fröhlich H., Seitz F., *Phys. Rev.*, **79**, 526 (1950).
К теории диэлектрического пробоя ионных кристаллов.
2140. Fröhlich H., Platzman R. L., *Phys. Rev.*, **92**, 1152 (1953). (Гл. 5, § 3.)
Потери энергии движущихся электронов на дипольную релаксацию.
2141. Fröhlich H., *Adv. Phys.*, **3**, 325 (1954).
Электроны в полях решетки.
2142. Fröhlich H., Pelzer H., *Proc. Phys. Soc.*, **A68**, 525 (1955). (Гл. 5, § 3.)
Плазменные колебания и энергетические потери заряженных частиц в твердых телах.
2143. Fröhlich H., Рагапјаре В. В., *Proc. Phys. Soc.*, **B69**, 21 (1956).
Диэлектрический пробой твердых тел.
2144. Fröhlich H., Рагапјаре В. В., Курег С. Г., Накајима С., *Proc. Phys. Soc.*, **B69**, 842 (1956).
Влияние столкновений электронов друг с другом и с поверхностями на электропроводность.
2145. Fröhlich H., Doniach S., *Proc. Phys. Soc.*, **B69**, 961 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Плазменное взаимодействие и проводимость полупроводников.
2146. Fröhlich H., в сборнике «Max Planck Festschrift», Berlin, 1958, S. 277. (Гл. 5, § 3.)
Феноменологическая теория энергетических потерь быстрых частиц в твердых телах.
2147. Fröhlich H., Sewall G. L., *Proc. Phys. Soc.*, **74**, 642 (1959).
Электропроводность полупроводников.
2148. Fröhlich H., Taylor A. W. B., *Proc. Phys. Soc.*, **83**, 739 (1964).
Уравнение Больцмана для электрон-фононных систем.

2149. Fröman P. O., Arkiv Fys., **5**, 135 (1952).
Численное сравнение матрицы плотности Rb^+ в статистическом приближении и в приближении Хартри.
2150. Fröman P. O., Arkiv Fys., **9**, 93 (1954). (Гл. 10, § 4.)
О статистическом расчете энергий связи ионных кристаллов.
2151. Fröman P. O., Arkiv Fys., **26**, 127 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Простые аналитические приближения для уравнения состояния идеального нерелятивистского газа Ферми — Дирака.
2152. Fröman P. O. (см. [3364]).
2153. Fues F., Stumpf H., Wahl F., Zs. Naturforsch., **13a**, 962 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Классическая нелинейная статистика одномерных дефектов решетки.
2154. Fues E., Stumpf H., Zs. Naturforsch., **14a**, 142 (1959).
Электрон-решеточное равновесное состояние в неидеальных кристаллах.
2155. Fujimoto F., Journ. Phys. Soc. Japan, **14**, 1558 (1959); **15**, 859, 1022 (1960).
Динамическая теория дифракции электронов в случае Лауэ. I. Общая теория. II. Численный расчет интенсивностей III. Запрещенное отражение.
2156. Fujimoto F., Sueoko O., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 2069 (1964).
Плазменные колебания электронов в сплавах. I. Сплавы Ag—Al.
2157. Fujimoto F. (см. [4540]).
2158. Fujita E., Usui T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **23**, 799 (1960).
Возбуждения в электронном газе высокой плотности. II. Диамагнетизм.
2159. Fujita E. (см. [2775]).
2160. Fujiwara H., Journ. Phys. Soc. Japan, **11**, 376 (1956). (Гл. 10, § 1.)
О применении метода Томаса — Ферми — Дирака к изучению остаточного сопротивления бинарных сплавов, содержащих инородные атомы малых концентраций.
2161. Fujiwara H., Journ. Phys. Soc. Japan, **13**, 250 (1958). (Гл. 10, § 1.)
Об экранированном поле у примесного атома в металле.
2162. Fujiwara H., Journ. Sci. Hiroshima Univ., **A25**, 1 (1961). (Гл. 10, § 1.)
О применении модифицированного метода Томаса — Ферми к атомам и кристаллам.
2163. Fukai M., Kawamura H., Sekido K., Imai I., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 30 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Уширение линии циклотронного резонанса, обусловленное рассеянием на решетке и на нейтральных примесях в Si и Ge.
2164. Fukai M. (см. [2831, 2832, 4260]).
2165. Фукс В. Б., ФТТ, **1**, 16 (1959).
О механизме подвижности ионов в металлах.
2166. Fukuda J., Iwamoto F., Sawada K., Phys. Rev., **135**, A932 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Линеаризованная задача многих тел
2167. Fukuda Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **20**, 353 (1965).
Электронные состояния в неидеальной двумерной решетке графита.
2168. Fukuroi T., Sci. Rep. Tohoku Univ., **A3**, 175 (1951). (Гл. 3, § 11.)
О ширине запрещенной зоны теллура.
2169. Fukuroi T., Yamanouchi C., Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ., **A9**, 267 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Соотношение между постоянной Холла и сопротивлением полупроводников с учетом различных механизмов рассеяния заряженных носителей.

2170. Fukuroi T., Saito Y., Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ., **A9**, 273 (1957). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в цинке.
2171. Fukuroi T. (см. [4586]).
2172. Fumi F. G., Tosi M. P., Phil. Mag., **2**, 284 (1957). (Гл. 10, § 4.)
О соотношении Наора между постоянными Маделунга для кубической ионной решетки.
2173. Fumi F. G., Tosi M. P., Phys. Rev., **117**, 1466 (1960). (Гл. 10, § 4.)
Распространение метода Маделунга на случай расчета решеточных сумм.
2174. Fumi F. G., Tosi M. P., Journ. Chem. Phys., **33**, 1 (1960). (Гл. 10, § 4.)
Постоянные Маделунга для кубических перовскитовых структур.
2175. Fumi F. G., Tosi M. P., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 1671 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Борновская энергия отталкивания в кристаллах хлористого натрия и хлористого калия.
2176. Fumi F. G., Tosi M. P., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 31 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Ионные радиусы и борновские параметры отталкивания в щелочногалогидных кристаллах типа NaCl. I. Формулы Хаггинса — Майера, и Паулинга.
2177. Fumi F. G. (см. [4565, 4568]).
2178. Fures A. J., Coleman R. V., Phys. Rev., **131**, 2084 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление монокристаллов меди.
2179. Fures A. J. (см. [1617]).
2180. Furukawa Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 737 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление сильнолегированного германия при низких температурах.
2181. Furukawa Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 1374 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление сильно легированного германия *n*- и *p*-типов при 4,2° К.
2182. Fuschillo N., Biertly J. N., Donahoe F. J., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 430 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Явления переноса в псевдобинарных сплавах системы $\text{Bi}_2\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$.
2183. Гайдук Ю. П., ЖЭТФ, **37**, 1281 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Топология поверхности Ферми золота.
2184. Гайдук Ю. П. (см. [949, 950, 951, 952, 953, 954, 955, 956]).
2185. Galasiewicz Z., Acta Phys. Polon., **15**, 49 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Обобщение метода дополнительных переменных на случай систем из частиц двух типов.
2186. Galasiewicz Z., Acta Phys. Polon., **15**, 79 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Об эквивалентности метода Зубарева и метода Бомы — Пайнса для систем частиц двух типов.
2187. Galasiewicz Z., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **17**, 613 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Взаимодействие со звуковыми квантами в системе, состоящей из двух сортов заряженных частиц; метод дополнительных переменных.
2188. Galatry L., Schuller F. G., Compt. Rend., **244**, 749 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Обратное поле и сдвиг частоты колебаний полярной молекулы в неполярной среде.

2189. Galatry L., Schuller F. G., *Compt. Rend.*, **245**, 901 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Обратное поле и сдвиг частоты колебаний полярной молекулы в полярной среде.
2190. Галкин А. А., Королук А. П., *ЖЭТФ*, **36**, 1307 (1959).
Анизотропия поглощения ультразвука в металлах в магнитном поле.
2191. Галкин А. А., Королук А. П., *ЖЭТФ*, **37**, 310 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Осцилляции коэффициента поглощения звука в олове при низкой температуре.
2192. Галкин А. А., Канер Э. А., Королук А. П., *ДАН СССР*, **134**, 74 (1960). (Гл. 3, § 9.)
О новом типе осцилляций коэффициента поглощения ультразвука в металлах в магнитном поле.
2193. Галкин А. А., Набережных В. П., Мельник В. Л., *ФТТ*, **5**, 201 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в алюминии.
2194. Галкин А. А., Набережных В. П., Мельник В. Л., *ЖЭТФ*, **44**, 127 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффективные массы электронов, ответственных за эффект де Газа — ван Альфена в алюминии.
2195. Галкин А. А. (см. [1215, 1216, 1217, 1218]).
2196. Гальперин Ф. М., *ДАН СССР*, **132**, 801 (1960).
О количестве $3d$ -электронов переходных металлов.
2197. Galt J. K., Yager W. A., Merritt F. R., Cetlin B. B., Dail H. W., Jr., *Phys. Rev.*, **100**, 748 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в металлах; висмут.
2198. Galt J. K., Yager W. A., Dail H. W., Jr., *Phys. Rev.*, **103**, 1586 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в графите.
2199. Galt J. K., Merritt F. R., Yager W. A., Dail H. W., Jr., *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 292 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в цинке.
2200. Galt J. K., Yager W. A., Merritt F. R., Cetlin B. B., Brailsford A. D., *Phys. Rev.*, **114**, 1396 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронное поглощение в металлическом висмуте и его сплавах.
2201. Galt J. K., Merritt F. R., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 159. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Наблюдения циклотронного резонанса в цинке.
2202. Galt J. K., Merritt F. R., Schmidt P. H., *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 458 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Наблюдения циклотронного резонанса в кадмии.
2203. Galt J. K. (см. [1336]).
2204. Гальванов В. В., *ЖЭТФ*, **27**, 651 (1957). (Гл. 3, § 11.)
О ширине запрещенной зоны в InSb.
2205. Гандельман Г. М., Павловский Е. С., *ЖЭТФ*, **38**, 1176 (1960). (Гл. 10, § 4.)
О квантовомеханическом расчете давления в твердых телах.
2206. Гандельман Г. М., *ЖЭТФ*, **43**, 131 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Квантовомеханический расчет уравнения состояния железа.
2207. Гантмахер В. Ф., *ЖЭТФ*, **42**, 1416 (1962).
Метод измерения импульса электронов в металле.
2208. Гантмахер В. Ф., *ЖЭТФ*, **44**, 811 (1963). (Гл. 5, § 1.)
Изучение поверхности Ферми олова методом размерного эффекта.

2209. Garcia-Moliner F., Simons S., Proc. Cambr. Phil. Soc., 53, 848 (1957).
Обобщение вариационного принципа в теории явлений переноса.
2210. Garcia-Moliner F., Proc. Phys. Soc., 72, 996 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление и поверхность Ферми щелочных металлов.
2211. Garcia-Moliner F., Phil. Mag., 3, 207 (1958). (Гл. 3, § 11.)
О поверхности Ферми меди.
2212. Garcia-Moliner F., Proc. Roy. Soc., A249, 73 (1959).
Вариационный расчет электронных кинетических коэффициентов в магнитном поле.
2213. Garfinkel M., Lindenfeld P., Phys. Rev., 110, 883 (1958).
Решеточная теплопроводность олова.
2214. Garfinkel M. (см. [1644]).
2215. Garland C. W., Slutsky L. J., Journ. Chem. Phys., 28, 331 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки гексагональных плотноупакованных металлов. II. Колебательный спектр.
2216. Garland C. W., Phys. Rev., 135, A1696 (1964).
Замечание об упругих свойствах β -олова.
2217. Garland C. W. (см. [4363]).
2218. Garlick G. F. J., Hough J. M., Fatehally R. A., Proc. Phys. Soc., 72, 925 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Природа связи в теллуриде кадмия.
2219. Garlick G. F. J., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 449 (1959).
Инфракрасные фосфоры-полупроводники.
2220. Garrett C. G. B., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, p. 844.
Органические полупроводники.
2221. Гашидзе Ф. М., ФТТ, 4, 2059 (1962).
Энергетическая структура сложных полупроводников и спектр дырок в соединениях со структурой типа вюрцита.
2222. Гашидзе Ф. М., ФТТ, 6, 1199 (1963).
Зонная структура полупроводниковых соединений типа $A^{IV}B^{IV}C_2^V$ со структурой халькопирита.
2223. Gaskell T., Proc. Phys. Soc., 77, 1182 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Коллективная трактовка фермиевского газа. II.
2224. Gaskell T., Proc. Phys. Soc., 80, 1091 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Коллективная трактовка систем многих тел. III.
2225. Gaspar R., Acta Phys. Hung., 3, 59 (1953). (Гл. 6, § 2.)
Когерентное рассеяние рентгеновских лучей и быстрых электронов атомами. Атомный формфактор.
2226. Gaspar R., Acta Phys. Hung., 2, 31 (1954). (Гл. 10, § 4.)
О силах связи в металлическом алюминии.
2227. Gaspar R., Acta Phys. Hung., 3, 263 (1954). (Гл. 10, § 2.)
Об аппроксимации потенциала Хартри — Фока универсальной функцией.
2228. Gaspar R., Csavinsky P., Acta Phys. Hung., 5, 65 (1955). (Гл. 10, § 4.)
К теории сил связи в двухатомных полярных молекулах. Связь в оксидах щелочноземельных металлов.
2229. Gaspar R., Molnar B., Acta Phys. Hung., 6, 119 (1956). (Гл. 10, § 4.)
О силах связи в металлическом серебре.
2230. Gaspar R., Acta Phys. Hung., 7, 313 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Теоретическая интерпретация оптических и электрических свойств теллура, селена и их сплавов.

2231. Gaspar R., Acta Phys. Hung., 9, 79 (1958).
Метод плоских волн с модифицированным потенциальным полем.
2232. Gautier F., Journ. Phys. Rad., 23, 738 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура сплавов на основе никеля и кобальта.
2233. Gautier F., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 387 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура примесей в никеле. Применение к магнитному рассеянию нейтронов в неупорядоченных сплавах на основе никеля.
2234. Gavenda J. D., Deaton B. C., Phys. Rev. Lett., 8, 208 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Резонансное поглощение ультразвука электронами открытых орбит в кадмии.
2235. Gavenda J. D. (см. [1723, 3640, 3641]).
2236. Geballe T. H., Hull G. W., Phys. Rev., 110, 773 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Изотопический и другие типы теплового сопротивления в германии.
2237. Geballe T. H., Herring C., Kunzler J. E., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 347 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Влияние увлечения фононов на термомагнитные эффекты в л-германии.
2238. Geballe T. H. (см. [1515, 2554, 2604, 3631]).
2239. Гейликман В. Т., ЖЭТФ, 32, 1206 (1957).
Магнитное взаимодействие электронов и аномальный диамагнетизм.
2240. Gell-Mann M., Brueckner K. A., Phys. Rev., 106, 364 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Энергия связи электронного газа высокой плотности.
2241. Gell-Mann M., Phys. Rev., 106, 369 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Удельная теплоемкость вырожденного электронного газа высокой плотности.
2242. Genensky S. M., Newell G. F., Journ. Chem. Phys., 26, 486 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные спектры и теплоемкость кристаллических полимерных цепочек.
2243. Генкин Г. М., ФТТ, 4, 2116 (1962). (Гл. 3, § 8.)
К кинетическому рассмотрению циклотронного резонанса в полупроводниках.
2244. Gerath R., Hübner K., Phys. Rev., 134, A235 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Средняя длина свободного пробега фонона в кремнии между 77 и 250° К.
2245. Герштейн Э. З., Савицкая Т. С., Сильбанс Л. С., ЖТФ, 2, 2472 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Исследование термоэлектрических свойств теллуристого свинца.
2246. Gesi K., Takagi Y., Takeuchi T., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 306 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в гидридах титана.
2247. Gavers R., Physica, 21, 888 (1955).
Перенос инжектированных электронов и дырок в полупроводнике.
2248. Ghose A., Palevsky H., Hughes D. J., Pelah I., Eisenhauer C. M., Phys. Rev., 113, 49 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Исследование колебаний решетки германия с помощью рассеяния холодных нейтронов.
2249. Gibbons D. F., Phil. Mag., 6, 445 (1961). (Гл. 3, § 9—11.)
Наблюдение осцилляций типа де Гааза—ван Альфена в магнитоакустическом затухании в цинке.
2250. Gibbons D. F., Falicov L. M., Phil. Mag., 8, 171 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Акустическое исследование электронной структуры цинка и кадмия.

2251. Gibson A. F., Paige E. G. S., *Phil. Mag.*, **3**, 950 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Интерпретация некоторых явлений перелоса в германии, содержащем параллельные ряды краевых дислокаций.
2252. Gibson A. F. (см. [1023]).
2253. Gibson J. B., Keller J. M., *Phys. Rev.*, **105**, 476 (1957).
Модифицированный потенциал деформируемых ионов для теплового рассеяния электронов.
2254. Gilbert R. E., Lonsdale E., *Acta Cryst.*, **9**, 697 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Анизотропные тепловые колебания кристаллов. I. Прямые измерения дебаевских факторов для мочевины.
2255. Gilet G., Dolling G., *Phys. Rev.*, **138**, A1053 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные колебания β -олова.
2256. Gillis J., Weiss G., *Phys. Rev.*, **115**, 1520 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Природа особенностей спектра одномерной ионной решетки.
2257. Gilvargy J. J., *Journ. Chem. Phys.*, **23**, 1925 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Постоянная Грюнайзена для некоторых металлов.
2258. Gilvargy J. J., *Phys. Rev.*, **102**, 308 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Законы Линдемана и Грюнайзена.
2259. Gilvargy J. J., *Phys. Rev.*, **102**, 317 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Закон Грюнайзена и кривая плавления при высоком давлении.
2260. Gilvargy J. J., *Phys. Rev.*, **102**, 325 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Уравнение для кривой плавления.
2261. Gilvargy J. J., *Phys. Rev.*, **102**, 331 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Параметр Грюнайзена для твердого тела при конечном напряжении.
2262. Gilvargy J. J., *Phys. Rev.*, **103**, 1700 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Амплитуды тепловых колебаний при плавлении.
2263. Gilvargy J. J., *Phys. Rev.*, **104**, 908 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Изменение амплитуд тепловых колебаний на кривой плавления.
2264. Gilvargy J. J., *Journ. Appl. Phys.*, **28**, 1253 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Уравнения состояния твердых тел, содержащие температуру.
2265. Гинзбург В. Л., *ФТТ*, **2**, 2031 (1960).
Несколько замечаний о фазовых переходах второго рода и микроскопической теории сегнетоэлектриков.
2266. Girifalco L. A., Lad R. A., *Journ. Chem. Phys.*, **25**, 693 (1956). (Гл. 10, § 4.)
Энергия связи, сжимаемость и потенциальная энергия системы графита.
2267. Girifalco L. A., Streetman J. R., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **4**, 182 (1958). (Гл. 10, § 4.)
Теоретический расчет релаксации атомов, окружающих вакансию в объемноцентрированной кубической решетке.
2268. Girifalco L. A., Weizer V. G., *Phys. Rev.*, **114**, 687 (1959). (Гл. 10, § 4.)
Приложение потенциальной функции Морзе к кубическим металлам.
2269. Гитерман М. Ш., *Физ. мет. и металловед.*, **5**, 364 (1957). (Гл. 11, § 7.)
К многоэлектронной теории ионных кристаллов.
2270. Гитерман М. Ш. (см. [4741, 4762]).
2271. Гицу Д. В., Иванов Г. А., *ФТТ*, **2**, 1457, 1464 (1960). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Электрические свойства монокристаллов висмута и его сплавов. I. Гальваномагнитные свойства чистого висмута. II. Гальваномагнитные свойства сплавов висмут — теллур (твердые растворы).
2272. Гицу Д. В., Иванов Г. А., *ФТТ*, **5**, 1406 (1963). (Гл. 3, § 11.)
О плотности электронных состояний в зоне проводимости висмута.

2273. Glaser V., Jaksic B., Periodicum Math. Phys. Astron. (Zagreb), 12, 257 (1957).
Методы решения интегрального уравнения Блоха при низких температурах.
2274. Glaser V., Jaksic B., Nuovo Cimento, 7, 259 (1958).
Обобщение вариационного принципа в теории электропроводности.
2275. Glasser M. L., Phys. Rev., 133, B831 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Суммирование по фейнмановским траекториям; заряженные частицы в однородном магнитном поле.
2276. Glasser M. L., Phys. Rev., 134, A1296 (1964); 135, A82 (1964).
Магнитные свойства почти свободных электронов; неосциллирующая магнитная восприимчивость.
2277. Глауберман А. Е., ДАН СССР, 108, 49 (1956).
К теории дипольных кристаллов во внешнем электрическом поле.
2278. Глауберман А. Е., Владимиров В. В., Стасюк И. В., ДАН СССР, 126, 543 (1959).
Новая форма полярной модели кристалла.
2279. Глауберман А. Е., Владимиров В. В., Стасюк И. В., ФТТ, 2, 133 (1960).
Теория элементарных возбуждений в атомных кристаллах.
2280. Глауберман А. Е. (см. [4457]).
2281. Glick A. J., Ferrell R. A., Ann. Phys., 11, 359 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Одночастичные возбуждения в вырожденном электронном газе.
2282. Glicksman M., Phys. Rev., 102, 1496 (1956). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные эффекты в полупроводнике с двумя наборами сфероидальных изоэнергетических поверхностей.
2283. Glicksman M., Christian S. M., Phys. Rev., 104, 1278 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Структура зоны проводимости в сплавах германий — кремний.
2284. Glicksman M., Phys. Rev., 108, 264 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Влияние примесного рассеяния на магнетосопротивление германия n -типа.
2285. Glicksman M., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 511 (1959). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление электронов в InP и GaAs .
2286. Глинчук М. Д., Дейген М. Ф., ФТТ, 5, 405 (1963).
К теории локальных электронных центров вблизи поверхности полупроводника.
2287. Gobrecht A., Townsend A., Zs. Phys., 161, 205 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства и зонная модель селена.
2288. Gold A., Phys. Rev., 123, 1965 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Модель электронной структуры K - и L -зон в щелочногалогенидных кристаллах.
2289. Gold A., Phys. Rev., 124, 1740 (1961). (Гл. 5, § 5.)
Расчет энергий возбуждения в твердых телах по методу сильной связи.
2290. Gold A., Journ. Phys. Chem. Solids, 18, 218 (1961).
Примесные состояния в твердом неоне.
2291. Gold A. V., Phil. Trans. Roy. Soc., A251, 85 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Экспериментальное определение поверхности Ферми в свинце.
2292. Gold A. V., Phil. Mag., 5, 70 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Плотность состояний в свинце.
2293. Gold A. V., MacDonald D. K. C., Pearson W. B., Templeton I. M., Phil. Mag., 5, 765 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Термо-э. д. с. чистой меди.

2294. Gold A. V., Priestley M. G., *Phil. Mag.*, 5, 1089 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми белого олова.
2295. Gold A. V. (см. [988]).
2296. Gold L., Roth L. M., *Phys. Rev.*, 103, 61 (1956). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 10 и 11.)
Расчет гальваномагнитных эффектов для электронов в германии и кремнии; магнетосопротивление при насыщении в высоких полях.
2297. Gold L., Bullis W. M., Campbell R. A., *Phys. Rev.*, 103, 1250 (1956). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонансного поглощения в многодолинных полупроводниках.
2298. Gold L., *Phys. Rev.*, 104, 1580 (1956).
Анизотропия задачи горячих электронов в полупроводниках со сферидальными изоэнергетическими поверхностями.
2299. Gold L., *Journ. Electron.*, 2, 131 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Вековое уравнение теории циклотронного резонанса для электронов в германии.
2300. Gold L., *Journ. Electron.*, 2, 323 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Плотность состояний гофрированных изоэнергетических поверхностей; решение нулевого порядка для дырок в кремнии и германии.
2301. Gold L., Roth L. M., *Phys. Rev.*, 107, 358 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 10 и 11.)
Расчет гальваномагнитных эффектов для германия и кремния *n*-типа; эффект Холла и общее поведение магнетосопротивления.
2302. Gold L., *Nature*, 181, 1316 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Плазменное приближение в теории металлической проводимости.
2303. Gold L., *Journ. Electron. Control.*, 4, 219 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Нелинейная феноменологическая теория плазменных колебаний.
2304. Gold L., *Phys. Rev.*, 114, 691 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Поведение горячих электронов в германии под действием магнитного поля.
2305. Goldberg C., Adams E. N., Davis R. E., *Phys. Rev.*, 105, 865 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление в германии *p*-типа.
2306. Goldberg C., Howard W. E., *Phys. Rev.*, 110, 1035 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Соотношения симметрии для магнетосопротивления в германии *p*-типа.
2307. Golden S., *Phys. Rev.*, 105, 604 (1957). (Гл. 10, § 1.)
Статистическая теория многоэлектронных систем. Общие соображения о теории Томаса — Ферми.
2308. Golden S., *Phys. Rev.*, 107, 1283 (1957). (Гл. 10, § 1.)
Статистическая теория многоэлектронных систем. Дискретные базы представлений.
2309. Golden S., *Rev. Mod. Phys.*, 32, 322 (1960). (Гл. 10, § 1.)
Статистическая теория электронных энергий.
2310. Goldsmid H. J., *Proc. Phys. Soc.*, 72, 17 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность теллурида висмута.
2311. Goldsmid H. J., *Journ. Appl. Phys.*, 32 (Suppl.), 2198 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Новейшие исследования теллурида висмута и его сплавов.
2312. Goldstone J., *Proc. Roy. Soc.*, A239, 267 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Обоснование метода Бракнера в задаче многих тел.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959, стр. 98.)

2313. Goldstone J., Gottfried K., Nuovo Cimento, 13, 849 (1959). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Коллективные возбуждения в ферми-газах.
2314. Голикова О. А., Стилльбанс Л. С., ФТТ, 3, 3115 (1961). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Исследование зависимости коэффициента Холла от магнитного поля и температуры в *p*-германии.
2315. Gombas P., Nature, 157, 668 (1946). (Гл. 10, § 1.)
Теория металлов.
2316. Gombas P., Hung. Acta Phys., 1, 1 (1947). (Гл. 10, § 1.)
К теории металлов.
2317. Gombas P., The Theory of, and Methods for Solving, Many-particle Problems in Wave Mechanics, Basel, 1950. (Гл. 10, § 1.) (См. перевод: П. Гомбаш, Проблема многих частиц в квантовой механике, ИЛ, 1952.)
2318. Gombas P., App. Phys., 9, 70 (1951). (Гл. 10, § 4.)
Об уравнении состояния, щелочных металлов.
2319. Gombas P., Acta Phys. Hung., 1, 301 (1952). (Гл. 3, § 11.)
К теории благородных и щелочных металлов.
2320. Gombas P., Acta Phys. Hung., 4, 187 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Обобщение уравнений Хартри — Фока на случай учета корреляции электронов.
2321. Gombas P., Acta Phys. Hung., 5, 123 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Решение основного уравнения статистической теории атома с учетом корреляции при давлении, отличном от нуля.
2322. Gombas P., Kipnagi O., Acta Phys. Hung., 5, 339 (1955). (Гл. 10, § 4.)
Об уравнении состояния благородных газов.
2323. Gombas P., Acta Phys. Hung., 7, 365 (1957).
Зависимость распределения момента электронов в атоме от давления.
2324. Gombas P., Acta Phys. Hung., 10, 101 (1959).
Расчет поляризуемостей. I. Свободные атомы.
2325. Gombas P., Acta Phys. Hung., 11, 201 (1960).
Расчет поляризуемостей. II. Зависимость поляризуемости от атомного объема.
2326. Gombas P., App. Phys., 7, 1 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Об обобщении статистической модели атома на случай учета корреляции.
2327. Gombas P., Zs. Naturforsch., 15a, 531 (1960). (Гл. 3, § 11.)
К теории металлического серебра.
2328. Gombas P., Acta Phys. Hung., 13, 233 (1961). (Гл. 11, § 7.)
О корреляционной энергии и корреляционном потенциале электронного газа.
2329. Gombas P., Acta Phys. Hung., 13, 455 (1961). (Гл. 10, § 1.)
Вывод основного уравнения статистической модели атома.
2330. Gombas P., Acta Phys. Hung., 14, 83 (1962). (Гл. 10, § 1.)
Поправка на корреляцию в статистической модели атома.
2331. Gombas P., Szondy T., Acta Phys. Hung., 14, 335 (1962). (Гл. 10, § 1.)
Высшие приближения статистической модели атома с учетом группировки электронов по основному квантовому числу.
2332. Gombas P., Phys. Lett., 3, 160 (1963). (Гл. 10, § 1.)
О статистических приближениях в задаче многих электронов.
2333. Gombas P., Zs. Phys., 172, 293 (1963). (Гл. 10, § 1.)
О статистических приближениях в задаче многих электронов.

2334. Gombas P., Rev. Mod. Phys., 35, 512 (1963). (Гл. 10, § 1.)
Состояние статистической теории атомов в настоящее время.
2335. Gonzalez J. A., Lopez-Alonso J. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 303 (1964).
Статистическая теория сегнетоэлектричества в триглицисульфате.
2336. Goodenough J. B., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 151 (1964).
Ян-теллеровские искажения, вызванные тетраэдрально расположенными Fe-ионами.
2337. Goodman B., Phys. Rev., 110, 888 (1958).
Адиабатическое и блоховское приближения в задаче о рассеянии электронов на фононах.
2338. Goodman B. (см. [1137]).
2339. Goodman R. R., Phys. Rev., 122, 397 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в германии.
2340. Goodman R. R. (см. [3377]).
2341. Горбань И. С., Укр. физ. журн., 5, 281 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое поглощение и структура энергетических состояний закиси меди.
2342. Горбань И. С., Рудько С. Н., ФТТ, 5, 1368 (1963).
Оптические свойства кристаллов карбида кремния.
2343. Гордеев Г. В., ФТТ, 2, 611 (1960).
К вопросу о внутреннем пробое в неполярных полупроводниках.
2344. Гордеев Г. В., ФТТ, 4, 3144 (1962).
Низкочастотные колебания плазмы в неполярных полупроводниках.
2345. Gordon A. N., Sondheimer E. H., Appl. Sci. Res., B3, 297 (1953) (Гл. 5, § 1.)
Вычисление поверхностного сопротивления в теории аномального скин-эффекта в металлах.
2346. Gordon W. L., Joseph A. S., Eck T. G., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 84. (Гл. 3, § 9 и 11.)
Исследование поверхности Ферми магния с помощью эффекта де Гааза — ван Альфена в слабых полях.
2347. Gordon W. L. (см. [2726, 2727, 4453, 4455]).
2348. Горкун Ю. И., Толпыго К. Б., ФТТ, 3, 2903 (1961). (Гл. 3, § 11.)
К теории явлений переноса в полупроводниках типа *p*-Ge.
2349. Gögllich P., Нога Н., Optik, 15, 116 (1958).
Теория внешнего фотоэффекта.
2350. Горный Н. Б., ЖЭТФ, 31, 132 (1958).
Дискретные потери энергии электронов при их отражении с поверхности MoO_2 .
2351. Goroff J., Kleinman L., Phys. Rev., 132, 1080 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Потенциалы деформации в кремнии. III. Влияние напряжений общего вида на уровни в зоне проводимости и в валентной зоне.
2352. Gosag P., Nuovo Cimento, 5, 1437 (1957).
Новый метод решения задач теории многократного рассеяния в неоднородных средах.
2353. Gosag P., Nuovo Cimento, 7, 742 (1958).
Распространение волн в слое среды с кубической периодической структурой.
2354. Goscinski O., Calais J. L., Arkiv Fys., 29, 135 (1955).
Некоторые замечания по поводу метода присоединенных молекулярных орбит в задаче об основном состоянии молекулы водорода.
2355. Gourary B. S., Adrian F. J., Phys. Rev., 105, 1180 (1957).
Приближенные волновые функции для *F*-центра и их использование в задаче об электронном спиновом резонансе.

2356. Gougarу V. S., Luke P. J., Phys. Rev., 107, 960 (1957).
Приближенные волновые функции для M -центра, полученные с помощью метода точечно-ионной решетки.
2357. Gougarу V. S., Phys. Rev., 112, 337 (1958).
Приближенные волновые функции для U -центра, полученные методом точечно-ионной решетки.
2358. Gougarу V. S., Magadudin A. A., Journ. Phys. Chem. Solids, 13, 88 (1960).
Спектры поглощения и излучения электрона в одномерной глубокой ловушке.
2359. Gougeaux M., Compt. Rend., 249, 1338 (1959). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Простое математическое представление для частотной зависимости комплексного показателя преломления металлов; применение к задаче о прозрачности щелочных металлов в ультрафиолетовой области.
2360. Gougeaux M., Compt. Rend., 249, 2020 (1959). (Гл. 3, § 11.)
О прозрачности щелочных металлов в ультрафиолете.
2361. Grabner L., Phys. Rev., 117, 689 (1960). (Гл. 2, § 4.)
Продольный эффект Холла.
2362. Grapato A., de Klerk J., Gruell R., Phys. Rev., 108, 895 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Дисперсия упругих волн в хлористом натрии.
2363. Green V. A., Jr., Chandrasekhar B. S., Phys. Rev. Lett., 11, 331 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Наблюдение осцилляций магнетострикции в висмуте при $4,2^\circ\text{K}$.
2364. Greene M. P., Kohn W., Phys. Rev., 137, A513 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Сопротивление твердого и жидкого натрия.
2365. Greene R. F., Journ. Electron. Control, 3, 387 (1957).
Охлаждение горячих электронов, вызванное акустическим рассеянием в вырожденных полупроводниках.
2366. Greene R. F. (см. [3329]).
2367. Greenfield A. J., Phys. Rev., 135, A1589 (1964). (Гл. 2, § 4.)
Постоянные Холла жидких металлов.
2368. Greenwood D. A., Proc. Phys. Soc., 71, 585 (1958). (См. перевод в сборнике «Вопросы теории необратимых процессов», ИЛ, 1961, стр. 208.)
Кинетическое уравнение в теории электропроводности металлов.
2369. Greenwood D. A., Proc. Phys. Soc., 79, 1282 (1962).
Электропроводность в поле одномерного неупорядоченного потенциала.
2370. Greenwood D. A., Proc. Phys. Soc., 80, 226 (1962).
К теории теплопроводности металлов.
2371. Greenwood D. A. (см. [1629]).
2372. Grenville-Wells H. J., Acta Cryst., 9, 709 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Анизотропные температурные колебания в кристаллах. II. Влияние изменений атомных факторов и температурных параметров на точность определения структуры мочевины.
2373. Grenville-Wells H. J. (см. [3331]).
2374. Grimes C. C., Kip A. F., Spong F., Stradling R. A., Pincus P., Phys. Rev. Lett., 11, 455 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс при наличии токовых слоев в алюминии.
2375. Grimes C. C., Kip A. F., Phys. Rev., 132, 1991 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в калии и натрии.
2376. Grimley T. B., Proc. Phys. Soc., 79, 1203 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Частоты нормальных мод химически адсорбированных атомов и молекул.

2377. Grimley T. B., Proc. Phys. Soc., **84**, 178 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Приближение Боппа для энергии системы N электронов.
2378. Grissie A. D. C., Phil. Mag., **9**, 847 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в кадмии в сильных магнитных полях.
2379. Groschwitz E., Wiesner R., Zs. Angew. Phys., **8**, 391 (1956). (Гл. 5, § 5.)
О вкладе электронов в оптические свойства полупроводников.
2380. Groschwitz E., Siebertz K., Zs. Naturforsch., **11a**, 482 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Проблема плазменных колебаний и волн в полупроводниках.
2381. Гросс Е. Ф., Разбирин Б. С., Якобсон М. А., ЖТФ, **27**, 207 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Линейчатый спектр края основного поглощения и структура кристаллов сернистого кадмия.
2382. Гросс Е. Ф., Захарченя Б. П., Разбирин Б. Е., ФТТ, **3**, 3083, (1961). (Гл. 3, § 11.)
Магнетооптические явления в спектре поглощения кристалла сульфида кадмия.
2383. Гросс Е. Ф., Калюжная Г. К., Недзведкий Д. С., ФТТ, **3**, 3543, (1961). (Гл. 3, § 11.)
Сложная структура спектра поглощения монокристаллического фосфида галлия.
2384. Gross I. E. P., App. Phys., **8**, 78 (1959).
Аналитические методы теории электрон-фононного взаимодействия.
2385. Groves S., Paul W., Phys. Rev. Lett., **11**, 194 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура серого олова.
2386. Gschneider K. A., Jr., Solid State Phys., **16**, 275 (1964).
Физические свойства и взаимосвязь металлических и полуметаллических элементов.
2387. Губанов А. И., ЖЭТФ, **30**, 862 (1956).
Рассеяние электронов в жидкости вследствие нарушения дальнего порядка.
2388. Губанов А. И., ЖЭТФ, **31**, 462 (1956).
Рассеяние электронов на тепловых колебаниях в жидкости.
2389. Губанов А. И., ЖТФ, **26**, 1651 (1956).
Длина свободного пробега электрона в жидких и аморфных проводниках.
2390. Губанов А. И., ЖТФ, **27**, 3 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Электропроводность, теплопроводность, термо-э. д. с., постоянные Холла и постоянная Нернста для аморфных тел с электронной проводимостью.
2391. Губанов А. И., ЖТФ, **27**, 2510 (1957).
Об изменении свойств полупроводников при плавлении.
2392. Губанов А. И., Нраньян А. А., ФТТ, **5**, 1678 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Зависимость спектра частот простой кубической решетки от деформации.
2393. Guenault A. M., MacDonald D. K. C., Proc. Roy. Soc., **A274**, 154 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние электронов и фононов. II. Термоэлектричество в рубидии, цезии и сплавах при очень низких температурах.
2394. Guentert O. J., Journ. Appl. Phys., **28**, 1515 (1957).
Влияние смещений слоев в структурах алмаза на рентгеновские дифракционные картины.

2395. Guertin R. F., Stern F., Phys. Rev., 134, A427 (1964).
Эффективные поля в кубических решетках с протяженными зарядами.
2396. Гуляев Ю. В., ФТТ, 1, 422 (1959).
К вопросу о рассеянии носителей тока на примесных центрах.
2397. Гуляев Ю. В. (см. [1308]).
2398. Gummel H., Lax M., Phys. Rev., 97, 1469 (1955).
Термическая ионизация и захват электронов ловушками в полупроводниках.
(См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 424.)
2399. Gummel H., Lax M., App. Phys., 2, 28 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Термический захват электронов в кремнии.
2400. Guppertson E. M., Phil. Trans. Roy. Soc., A249, 299 (1957). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в алюминии.
2401. Gupther L., Phys. Rev., 138, A1697 (1965). (Гл. 8, § 5.)
Влияние примесей на колебания решетки щелочногалогидных кристаллов.
2402. Gupta K. P., Cheng C. H., Beck P. A., Journ. Phys. Rad., 23, 721 (1962). (Гл. 1, § 4.)
Обзор электронных теплоемкостей объемноцентрированных кубических и гранецентрированных кубических твердых растворов переходных элементов первого большого периода.
2403. Гуревич А. В., ЖЭТФ, 32, 1237 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Упрощение уравнений для функции распределения электронов в плазме.
2404. Гуревич Л. Э., Урицкий З. И., ЖТФ, 28, 932 (1958).
Осцилляции коэффициента поглощения кристаллов в магнитном поле в области внутреннего фотоэффекта.
2405. Гуревич Л. Э., Урицкий З. И., ФТТ, 1, 1298 (1959). (Гл. 5, § 5.)
К теории длинноволнового поглощения кристаллов.
2406. Гуревич Л. Э., Недлин Г. М., ЖЭТФ, 37, 765 (1959).
Термоэлектрические коэффициенты в металлах в сильном магнитном поле и влияние увлечения электронов фононами.
2407. Гуревич Л. Э., Ипатова И. П., ЖЭТФ, 37, 1324 (1959).
Эффект Фарадея в полупроводниках на свободных носителях в сильном магнитном поле.
2408. Гуревич Л. Э., Урицкий З. И., ФТТ, 2, 1239 (1960). (Гл. 5, § 5.)
К теории инфракрасного поглощения кристаллов.
2409. Гуревич Л. Э., Недлин Г. М., ФТТ, 3, 2779 (1961).
Термо-э. д. с. полупроводников в квантовом магнитном поле при учете увлечения электронов фононами.
2410. Гуревич Л. Э., Ипатова И. П., ФТТ, 4, 2065 (1962). (Гл. 5, § 5.)
Поглощение электромагнитных волн гомеополлярными кристаллами.
2411. Гуревич Л. Э., Ясевич И. Н., ФТТ, 4, 2854 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Теория ферромагнитного эффекта Холла.
2412. Гуревич Л. Э., Эфрос А. Л., ЖЭТФ, 43, 561 (1962).
Влияние спина на осцилляции Шубникова — де Гааза как возможный метод определения эффективной массы носителя тока.
2413. Гуревич Л. Э., Коренблит И. Я., ЖЭТФ, 54, 2150 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Электропроводность и гальваномагнитные коэффициенты полуметаллов и вырожденных полупроводников в сильном электрическом поле.
2414. Гуревич Л. Э., Иоффе И. В., ФТТ, 5, 2674 (1963).
Теория неустойчивости тока в полупроводниках и полуметаллах.

2415. Гуревич Л. Э. (см. [1474]).
2416. Гуревич В. Л., ЖЭТФ, 35, 668 (1958). (Гл. 3, § 10.)
Осцилляции проводимости металлических пленок в магнитном поле.
2417. Гуревич В. Л., ЖЭТФ, 37, 71, 1680 (1959). (Гл. 3, § 9.)
Поглощение ультразвука в металлах в магнитном поле. I, II.
2418. Гуревич В. Л., ФТТ, 1, 1474 (1959).
К теории теплопроводности диэлектриков.
2419. Гуревич В. Л., Скобов В. Г., Фирсов Ю. А., ЖЭТФ, 40, 786 (1961). (Гл. 3, § 9.)
Гигантские квантовые осцилляции поглощения звука металлами в магнитном поле.
2420. Гуревич В. Л., ФТТ, 4, 909 (1962).
К теории поглощения звука в пьезоэлектриках.
2421. Гуревич В. Л., Фирсов Ю. А., Эфрос А. Л., ФТТ, 4, 1813 (1962). (Гл. 3, § 10.)
Новый тип осцилляций магнетосопротивления полупроводников и полуметаллов.
2422. Гуревич В. Л., Каган В. Д., ФТТ, 4, 2441 (1962).
Поглощение ультразвука в пьезоэлектрических полупроводниках.
2423. Гургенишвили Г. Е., Пхакадзе М. Г., Саралидзе З. К., ФТТ, 6, 554 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Магнетооптическое поглощение в валентной зоне германия.
2424. Гургенишвили Г. Е. (см. [1104]).
2425. Gurney R. W., Phys. Rev., 88, 465 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки графита.
2426. Gurney R. W., Phys. Rev., 88, 466 (1952).
Рассеяние медленных нейтронов в поликристаллических средах.
2427. Гуро Г. М., ЖЭТФ, 33, 158 (1957).
Закон затухания концентрации неравновесных носителей заряда в полупроводниках.
2428. Гуро Г. М., ЖТФ, 28, 1036 (1958).
К теории фотоэлектромагнитного эффекта в полупроводниках.
2429. Гуро Г. М., ФТТ, 1, 3 (1959).
Характеристические времена стационарных электронных процессов в полупроводниках.
2430. Гурвич Ю. А., ФТТ, 5, 2786 (1963). (Гл. 3, § 8.)
О циклотронном резонансе на горячих электронах.
2431. Гуржи Р. Н., ЖЭТФ, 33, 451 (1957).
Квантовое кинетическое уравнение для электронов в металлах.
2432. Гуржи Р. Н., Азбель М. Я., ЖЭТФ, 38, 524 (1960).
Время релаксации электронов в высокочастотном электромагнитном поле и поверхностный импеданс металла.
2433. Гуржи Р. Н. (см. [1056]).
2434. Гусева Г. И., Талуц Г. Г., Физ. мет. и металловед., 7, 658 (1959). (Гл. 11, § 7.)
К теории коллективных возбуждений системы электронов в твердом теле.
2435. Guthrie G. L., Friedberg S. A., Goldman J. E., Phys. Rev., 113, 45 (1959). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость некоторых обогащенных медью медно-никелевых сплавов при гелиевых температурах.
2436. Guthrie G. L., Phys. Rev., 113, 793 (1959). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость псевдомеди ниже 4,2° К.
2437. Gutzwiller M. C., Phys. Rev., 137, A1726 (1965).
Корреляция электронов в узкой s-зоне.

2438. Haas C., Ketelaar J. A. A., Phys. Rev., **103**, 564 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Ширина полос инфракрасного отражения.
2439. Haas C., Ketelaar J. A. A., Physica, **22**, 1286 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Эффективное поле и частота обертонов и комбинационных зон в колебательных спектрах кристаллов.
2440. Haase R., Zs. Naturforsch., **11a**, 681 (1956).
К теории термоэлектричества.
2441. Hadzi D., Jour. Chem. Phys., **34**, 1445 (1961). (Гл. 5, § 5.)
Далекое инфракрасные полосы некоторых кристаллов с сильными водородными связями.
2442. Haering R. R., Wallace P. R., Jour. Phys. Chem. Solids, **3**, 253 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электрические и магнитные свойства графита.
2443. Haering R. R., Canad. Jour. Phys., **36**, 1161 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Зеемановское расщепление донорных состояний в германии.
2444. Haering R. R., Canad. Jour. Phys., **37**, 47 (1959).
О движении электронов и дырок в неидеальной решетке.
2445. Haering R. R. (см. [1886, 3579]).
2446. Haga E., Jour. Phys. Soc. Japan, **14**, 35 (1959).
О теории термоэлектричества в двухзонных полупроводниках.
2447. Haga E., Jour. Phys. Soc. Japan, **19**, 2030 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Инфракрасное поглощение полупроводников при низких температурах.
2448. Haga S., Kimura H., Jour. Phys. Soc. Japan, **19**, 1596 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Инфракрасное поглощение на свободных носителях в полупроводниках типа III—V. IV. Переходы внутри зоны проводимости.
2449. Hagstrum H. D., Jour. Chem. Phys. Solids, **8**, 211 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Плотность состояний в валентной зоне кремния.
2450. Hajdu J., Zs. Phys., **160**, 481 (1960). (Гл. 3, § 10.)
К теории изменения сопротивления в магнитном поле. II.
2451. Haken H., Zs. Naturforsch., **9a**, 228 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Структура решения многоэлектронной задачи в твердом теле и теорема Блоха.
2452. Haken H. (см. [4756]).
2453. Halford J. O., Jour. Chem. Phys., **19**, 1375 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные частоты одномерного кристалла. II. Приближенная форма колебательного спектра изотропного твердого тела.
2454. Halford J. O., Jour. Chem. Phys., **20**, 822 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные частоты простой кубической решетки. III.
2455. Hall G. L., Phys. Rev., **116**, 604 (1959).
Теория Нордгейма сопротивления сплавов.
2456. Hall L. H., Phys. Rev., **136**, A1136 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука в металлах в гидродинамическом приближении.
2457. Halpern J., Lax V., Nishina Y., Phys. Rev., **134**, A140 (1964). (Гл. 3 § 8.)
Квантовая теория межзонных эффектов Фарадея и Фогта.
2458. Halpern V., Jour. Phys. Chem. Solids, **24**, 1495 (1963).
Интегралы перекрытия в плоских кристаллах.
2459. Hambleton K. C., Nilsum C., Holeman B. R., Proc. Phys. Soc., **77**, 1147 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Определение эффективного ионного заряда арсенида галлия из прямых измерений диэлектрической проницаемости.

2460. Напатуга Е., Ипуи Т., Тоюзавва У., Journ. Phys. Soc. Japan, 17, 666 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс горячих электронов в чистом германии.
2461. Напатуга Е. (см. [4588]).
2462. Нандлер Р., Journ. Phys. Chem. Solids, 14, 1 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Схемы энергетических уровней на поверхностях германия и кремния.
2463. Напетан Д., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 842.
Свободные связи в полупроводниках.
2464. Нанлон J. E., Lawson A. W., Phys. Rev., 113, 472 (1959). (Гл. 9, § 5.)
Эффективный ионный заряд в щелочногалогидных кристаллах.
2465. Нанпа I. I., Sondheimer E. H., Proc. Roy. Soc., A239, 247 (1957).
Электронная и решеточная теплопроводность металлов.
2466. Нарбеске Г., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 957 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Край поглощения в сегнетоэлектрическом SbSI в электрическом поле.
2467. Нардью J. R., Phil. Mag., 4, 1278 (1959). (Гл. 8, § 6.)
Колебательный спектр решетки хлористого натрия.
2468. Нардью J. R., Каго А. М., Phil. Mag., 5, 859 (1960). (Гл. 8, § 6.)
Колебания решетки хлористого натрия; экспериментальные и теоретические значения теплоемкости.
2469. Нардью J. R., Phil. Mag., 6, 27 (1961). (Гл. 8, § 6.)
Эффективный ионный заряд и колебания решетки.
2470. Нардью J. R., Phil. Mag., 7, 315 (1962). (Гл. 8, § 6.)
Динамика решетки щелочногалогидных кристаллов в связи с данными по теплоемкости.
2471. Нардью J. R., Proc. Phys. Soc., 79, 1154 (1962).
Влияние оптических фононов на спектры поглощения мелких примесных центров.
2472. Нардью J. R. (см. [2808]).
2473. Нарман Т. С., Strauss A. J., Dickey D. H., Dresselhaus M. S., Wright G. B., Mavroides J. G., Phys. Rev. Lett., 7, 403 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Малые эффективные массы электронов и ширина запрещенной зоны в $Cd_xHg_{1-x}Te$.
2474. Нарман Т. С., Honig J. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 913 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Гальванотермомангнитные эффекты в вырожденных полупроводниках и полуметаллах с непараболическими зонами. II.
2475. Нарман Т. С., Honig J. M., Tarney V. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 835 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Гальванотермомангнитные эффекты в полупроводниках и полуметаллах. III. Стандартная зонная модель и модель Кейна.
2476. Нарман Т. С., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 931 (1964). (Гл. 2, § 4.)
Гальванотермомангнитные эффекты в полупроводниках и полуметаллах. IV. Селенид ртути.
2477. Наррег А. Ф. А., Kemp W. R. G., Klemens P. G., Tainish R. J., White G. K., Phil. Mag., 2, 577 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность и электропроводность хрома при низких температурах.
2478. Наррег Р. Г., Proc. Phys. Soc., A68, 874 (1955).
Движение электронов проводимости в одной зоне в однородном магнитном поле.

2479. Hargre P. G., Proc. Phys. Soc., **A68**, 879 (1955).
Общее движение электронов проводимости в однородном магнитном поле с приложением к диамагнетизму кристаллов.
2480. Hargre P. G., Proc. Phys. Soc., **B69**, 1095 (1956).
Влияние электрон-фононного взаимодействия на фононные частоты.
2481. Hargre P. G., Proc. Phys. Soc., **B70**, 390 (1957).
Взаимодействие электронов с колебаниями решетки.
2482. Hargre P. G., Proc. Phys. Soc., **74**, 545 (1959).
Электрон-фононное взаимодействие в металлах.
2483. Hargre P. G. (см. [3766]).
2484. Hargrick N. J., Phys. Rev., **103**, 1173 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Применение поглощения инфракрасного излучения для исследования распределения носителей тока при инжекции и экстракции.
(См. перевод в сборнике «Рекомбинация носителей тока в полупроводниках», ИЛ, 1959, стр. 110.)
2485. Hargrick N. J., Journ. Appl. Phys., **29**, 764 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Характеристики германиевых переходов.
2486. Harrison M. J., Phys. Rev. Lett., **1**, 442 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Зависимость поглощения ультразвука от магнитного поля.
2487. Harrison M. J., Phys. Rev., **119**, 1260 (1960). (Гл. 3, § 9.)
Поглощение звука в полуметаллах в магнитном поле; продольные волны.
2488. Harrison M. J., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 1079 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Коллективное возбуждение вырожденной плазмы в твердых телах.
2489. Harrison M. J. (см. [1598]).
2490. Harrison R. J., Paskin A., Journ. Phys. Soc. Japan, **15**, 1902 (1960).
Об «экранированных потенциалах примеси в металлах».
2491. Harrison W. A., Phys. Rev., **104**, 1281 (1956).
Рассеяние электронов колебаниями решетки в неполярных кристаллах.
2492. Harrison W. A., Journ. Phys. Chem. Solids, **5**, 44 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Сопrotивление, обусловленное дислокациями в меди.
2493. Harrison W. A., Phys. Rev., **136**, A1107 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Теория натрия, магния и алюминия.
2494. Harrison W. A. (см. [1598]).
2495. Hart E. W., Phys. Rev., **106**, 467 (1957).
Поляризация зоны проводимости в разбавленных сплавах.
2496. Harvey W. W., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 1545 (1962).
Соотношение между химическим потенциалом электронов и параметрами зонной схемы в применении к полупроводникам.
2497. Hasegawa A., Yamashita J., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 875 (1962).
Метод матрицы плотности в задаче о горячих электронах.
2498. Hasegawa A., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 504 (1964).
Влияние давления на электропроводность щелочных металлов.
2499. Hasegawa H., Phys. Rev., **129**, 1029 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Теория циклотронного резонанса в напряженных кристаллах кремния.
2500. Hasegawa H. (см. [1648, 3113, 3114]).
2501. Hashimoto H., Maппami M., Naiki T., Phil. Trans. Roy. Soc., **A253**, 459, 490 (1961).
Динамическая теория дифракции электронов в связи с задачей об изображении кристаллической решетки в электронном микроскопе. I.

- Изображение монокристаллов. II. Изображения осажденных кристаллов (картины муара).
2502. Hashimoto K., Suzuki H., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 1340 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные эффекты в Bi_2Se_3 при $4,2^\circ \text{K}$.
2503. Haslett J. C., Love W. F., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 518 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в InSb n -типа при низких температурах в сильных магнитных полях.
2504. Hass M., Journ. Phys. Chem. Solids, **24**, 1159 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Спектры инфракрасного решеточного отражения LiCl , LiBr , KF , RbF и CsF .
2505. Hass M. (см. [3905]).
2506. Hattori M., Yamada K., Journ. Phys. Soc., Japan, **18**, 200 (1963).
Низколежащие энергетические потери в серебряных пленках.
2507. Hattori M., Yamada K., Suzuki H., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 203 (1963).
Плазменное резонансное поглощение в тонких металлических пленках.
2508. Hattori M. (см. [4556]).
2509. Hattori T., Steele M. C., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 1294 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Самомагнетосопротивление и пинч-эффект в висмуте.
2510. Hattori T., Tosima S., Journ. Phys. Soc., Japan, **20**, 44 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Влияние собственного магнитного поля на гальваномагнитные эффекты в висмуте.
2511. Haug A., Zs. Phys., **146**, 75 (1956).
Адиабатическое приближение и члены взаимодействия в теории неполярных твердых тел.
2512. Haug A., Zs. Phys., **148**, 504 (1957).
О введении члена взаимодействия для полярных и неполярных твердых тел.
2513. Haug A., Schöpnhofer A., Zs. Phys., **148**, 511 (1957).
Расщепление энергетических зон и появление уровней в запрещенной зоне при сдвиге атомов решетки в твердых телах.
2514. Haven Y., van Santen J. H., Nuovo Cimento, Suppl., **7**, 605 (1958).
Диэлектрическая релаксация решеточных дефектов в кристаллах.
2515. Havinga E. E., Phys. Rev., **119**, 1193 (1950). (Гл. 8, § 5.)
Теория диэлектрических свойств щелочных галоидов.
2516. Hayakawa S., Hokkyo N., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **15**, 193 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Электромагнитное излучение электронной плазмы.
2517. Hayasi T., Teguyama S., Sagawa T., Sci Rep. Tohoku Univ., **42**, 138 (1958).
Дискретные состояния электрона в одномерном периодическом поле, имеющем смещенную ячейку.
2518. Haynes J. R., Hognbeck J. A., Phys. Rev., **100**, 606 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Захват неосновных носителей в кремнии. II. Кремний n -типа. (См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 187.)
2519. Haynes J. R., Lax M., Flood W. F., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 394 (1959).
Исследование собственного рекомбинационного излучения.

2520. Hebborn J. E., Sondheimer E. H., Journ. Phys. Chem. Solids, **13**, 105 (1960).
Диамagnetизм электронов проводимости в металлах.
2521. Hebborn J. E., March N. H., Proc. Roy. Soc., **A280**, 85 (1964).
Диамagnetизм электронов проводимости в сплавах и диэлектрическая проницаемость ферми-газа, зависящая от магнитного поля.
2522. Hebborn J. E., Luttinger J. M., Sondheimer E. H., Stiles P. J., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 741 (1964).
Орбитальная диамagnetическая восприимчивость блоховских электронов.
2523. Hebel L. C., Phys. Rev., **138**, A1641 (1965). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в висмуте со слегка аномальным скин-эффектом.
2524. Hebel L. C. (см. [4377]).
2525. Hedgcock F. T., Muir W. B., Journ. Appl. Phys., **33** (Suppl.), 1079 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в сплавах цинка с марганцем.
2526. Hedgcock F. T., Muir W. B., Phys. Rev., **129**, 2045 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в цинковом сплаве, обладающем минимумом сопротивления.
2527. Hedgcock F. T., Muto Y., Phys. Rev., **134**, A1593 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Низкотемпературное магнетосопротивление в магнии и алюминии, содержащих небольшие примеси марганца или железа.
2528. Hedgcock F. T., Muir W. B., Phys. Rev., **138**, A561 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Влияние решеточного рассеяния на правило Матиссена в разбавленных бинарных магниевых сплавах.
2529. Hedgcock F. T. (см. [2056]).
2530. Heikes R. R., Johnston W. D., Journ. Chem. Phys., **26**, 582 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Механизм проводимости в окислах переходных металлов с замещением литием.
2531. Heine V., Proc. Camb. Phil. Soc., **52**, 546 (1956).
Термодинамика тел в статических электромагнитных полях.
2532. Heine V., Proc. Phys. Soc., **A69**, 505 (1956). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в сплавах.
2533. Heine V., Proc. Phys. Soc., **A69**, 513 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура висмута.
2534. Heine V., Phys. Rev., **107**, 431 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонанса в металлах.
2535. Heine V., Proc. Phys. Soc., **81**, 300 (1963).
Общая теория поверхностных состояний и рассеяние электронов в твердых телах.
2536. Heine V., Abagenkov I., Phil. Mag., **9**, 451 (1964).
Новый метод исследования электронной структуры металлов.
2537. Heine V., Phys. Rev., **138**, A1689 (1965).
Теория поверхностных состояний.
2538. Heine V. (см. [1097, 1597, 2001]).
2539. Heller W. R., Phys. Rev., **84**, 1130 (1951).
Кинетико-статистическая теория диэлектрического пробоя неполярных кристаллов.
2540. Helms G., Ann. Phys., **17**, 356 (1956); **19**, 41 (1956).
Теория электронов, связанных с дефектом. I. Оптические переходы.
II. Безызлучательные переходы.

2541. Henry J., Bull. Acad. Roy. Belg. Classe Sci., **42**, 51 (1956).
Об изотопических явлениях в решетках.
2542. Hensel J. C., Peter M., Phys. Rev., **114**, 411 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Эффект Штарка при циклотронном резонансе в вырожденных зонах.
2543. Hensel J. C., Feher G., Phys. Rev. Lett., **5**, 307 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Параметры валентной зоны кремния согласно циклотронному резонансу в кристаллах, подвергнутых одноосному растяжению или сжатию.
2544. Hensel J. C., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 281. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Квантовые эффекты в циклотронном резонансе дырок в вырожденных зонах германия.
2545. Hensel J. C., Hasegawa H., Nakayama M., Phys. Rev., **138**, A225 (1965). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в одноосно сжатом кремнии. II. Природа ковалентной связи.
2546. Herstein F. N., Adv. Phys., **10**, 313 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Методы измерения дебаевской температуры и сравнение результатов для некоторых кубических кристаллов.
2547. Herman F., Journ. Phys. Chem. Solids, **2**, 72 (1957).
Доклад на втором симпозиуме по физике полупроводников.
2548. Herman F., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 405, 421 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Колебательный спектр германия.
2549. Herman F. (см. [1360, 1953, 3149, 4838]).
2550. Herpin A., Journ. Phys. Rad., **18**, 649 (1957).
Распространение нейтронов в идеальных кристаллах конечных размеров.
2551. Herrikhoff R. J., Arakawa E. T., Birkhoff R. D., Phys. Rev., **137**, A1433 (1965).
Оптико-эмиссионные исследования характеристических энергетических потерь в Cd, In и Zn.
2552. Herring C., Phys. Rev., **96**, 1163 (1954).
Теория термо-э. д. с. в полупроводниках.
2553. Herring C., Vogt E., Phys. Rev., **101**, 944 (1956). (См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 567.)
Теория явлений переноса и потенциала деформаций для полупроводников со многими минимумами на изоэнергетических поверхностях и с анизотропным рассеянием.
2554. Herring C., Geballe T. H., Kunzler J. E., Phys. Rev., **111**, 36 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Влияние увлечения фононов на термомагнитные эффекты в германии *n*-типа. I.
2555. Herring C., в книге «Semiconductors and Phosphors», Brunswick, Germany, 1958, p. 184.
Роль низкочастотных фононов в термоэлектричестве и теплопроводности.
2556. Herring C., Flicker M., Phys. Rev., **134**, A362 (1964).
Асимптотическое обменное взаимодействие двух атомов водорода.
2557. Herring C. (см. [2237, 3631, 3846]).
2558. Hexter R. M., Dows D. A., Journ. Chem. Phys., **25**, 504 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Низкочастотные колебания и колебательные спектры молекулярных кристаллов.

2559. Hexter R. M., *Journ. Mol. Spectry.*, **3**, 67 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Низкочастотные колебания и колебательные спектры молекулярных кристаллов.
2560. Heywang M., Zerbst M., *Zs. Naturforsch.*, **14a**, 641 (1959).
К теории механизма захвата в полупроводниках.
2561. Higgins R. J., Marcus J. A., Whitmore D. H., *Phys. Rev.*, **137**, A1172 (1965). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в Зп в промежуточных полях.
2562. Higgs P. W., *Acta Cryst.*, **8**, 99 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Изменение распределения электронов при колебаниях молекулярных кристаллов. II. Среднеквадратичные амплитуды теплового движения.
2563. Hill R. W., Smith P. L., *Phil. Mag.*, **44**, 636 (1953). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость бериллия при низких температурах.
2564. Hilsom C., Bagrie R., *Proc. Phys. Soc.*, **71**, 676 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Свойства антимонида индия p -типа. I. Электрические свойства.
2565. Hinkley E. D., Ewald A. W., *Phys. Rev.*, **134**, A1261 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления серого олова.
2566. Hirschfelder J. O., Lipsett J. W., *Journ. Chem. Phys.*, **18**, 130 (1950). (Приложение 5, § 5 и 7.)
Энергия взаимодействия между двумя атомами водорода.
2567. Ho Yu-Ping, *Acta Phys. Sinica*, **10**, 273 (1963)
Мелкие примесные состояния в полупроводниках.
2568. Hobden M. V., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **23**, 821 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Прямые оптические переходы из отщепленной валентной зоны в зону проводимости германия.
2569. Hodgson J. N., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 1213 (1963). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Оптическая эффективная масса и край поглощения электронов в натрия.
2570. Hoerni J., Wooster W. A., *Acta Cryst.*, **5**, 386 (1952). (Гл. 8, § 1.)
Определение упругих постоянных фторида лития из фотографий диффузного отражения рентгеновских лучей.
2571. Hoerni J., *Phys. Rev.*, **102**, 1534 (1956). (Гл. 8, § 1.)
Многократное упругое рассеяние при дифракции электронов на кристаллах.
2572. Hoffmann T. A., *Phys. Rev.*, **70**, 981 (1946). (Гл. 8, § 5.)
О динамике кристалла RbI.
2573. Hoffmann T. A., *Acta Phys. Hung.*, **1**, 34 (1947). (Гл. 8, § 5.)
О динамике кристалла RbI.
2574. Hohenberg P., Kohn W., *Phys. Rev.*, **136**, B864 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Неоднородный электронный газ.
2575. Holland V. W., *Proc. Phys. Soc.*, **80**, 557 (1962).
Экстремумы энергии электрона в периодическом поле.
2576. Holland M. C., *Phys. Rev.*, **134**, A471 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Рассеяние фононов в полупроводниках по данным о теплопроводности.
2577. Holstein T., *Phys. Rev.*, **113**, 479 (1959). (Гл. 3, § 9; гл. 8, § 5.)
Теория поглощения ультразвука в металлах. Эффект увлечения при столкновениях.
2578. Holstein T. (см. [910, 2913]).
2579. Holt D. B., *Journ. Appl. Phys.*, **31**, 2208 (1960).
Заполненные и пустые «болтающиеся» связи в соединениях III—V.

2580. Hone D., Phys. Rev., **120**, 1600 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Обменная и корреляционная поправки к электрон-фононному взаимодействию.
2581. Hooton D. J., Phil. Mag., **3**, 49 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Модель в теории ангармонической динамики решетки.
2582. Hopfield J. J., Phys. Rev. Lett., **8**, 311 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Классическое объяснение аномального магнетосопротивления висмута.
2583. Hopfield J. J., Worlock J. M., Park K., Phys. Rev. Lett., **11**, 414 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Двухквантовый спектр поглощения KI.
2584. Hopfield J. J. (см. [1118]).
2585. Hoppe W., Acta Cryst., **9**, 770 (1956) (Гл. 8, § 1.)
Интерпретация диффузного рассеяния тепловых волн за пределами диапазона в обратном пространстве, занятого кристаллическими отражениями.
2586. Hori J., Asahi T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **17**, 523 (1957). (Гл. 8, § 5.)
О колебаниях неупорядоченной линейной решетки.
2587. Hori J., Fukushima M., Jounp. Phys. Soc. Japan, **19**, 296 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Почему колебательный спектр неупорядоченной цепочки содержит много различных пиков?
2588. Horowitz M., Daunt J. G., Phys. Rev., **91**, 1099 (1953). (Гл. 1, § 4; гл. 8, § 5.)
Электронные и решеточные теплоемкости в W, Mo и Re.
2589. Horton G. K., Schiff H., Phys. Rev., **104**, 32 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Низкотемпературное поведение и дисперсионные кривые для гранцентрированных кубических металлов.
2590. Horton G. K., Schiff H., Canad. Jounp. Phys., **36**, 1127 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Низкотемпературное поведение дебаевских характеристических температур.
2591. Horton G. K., Schiff H., Proc. Roy. Soc., **A251**, 248 (1959). (Гл. 8, § 5.)
О вычислении эквивалентных дебаевских температур и связанных с этим задач.
2592. Horton G. K., Proc. Roy. Soc., **A252**, 551 (1959). (Гл. 8, § 5.)
О дисперсии фононов в металлах.
2593. Horton G. K. (см. [1214]).
2594. Houston W. V., Rev. Mod. Phys., **20**, 161 (1948). (Гл. 8, § 5.)
Нормальные колебания кристаллической решетки.
2595. Hovi V., Paumoto Y., Ann. Acad. Sci. Fennicae, **A6** (68) (1960). (Гл. 8, § 5.)
О колебательных спектрах твердых тел, рассчитанных по экспериментальным значениям теплоемкости.
2596. Hovi V., Paumoto Y., Ann. Acad. Sci. Fennicae, **A6** (84), 1961. (Гл. 8, § 5.)
О колебательной и нулевой энергиях щелочных галоидов.
2597. Howard R. E., Lidiard A. B., Discussions Faraday Soc., **23**, 113 (1957).
Термо-э. д. с. ионных кристаллов.
2598. Howard R. E., Lidiard A. B., Phil. Mag., **2**, 1462 (1957).
Термо-э. д. с. ионных проводящих кристаллов.

2599. Howard D. J., Jones R. H., Putley E. H., Proc. Phys. Soc., **B70**, 124 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Зависимость постоянной Холла в случае смешанной проводимости от магнитной индукции (пример антимонида индия).
2600. Howland L. P., Phys. Rev., **109**, 1927 (1958). (Гл. 3, § 11; гл. 9 § 6; гл. 10, § 4.)
Зонная структура и энергия связи хлористого калия.
2601. Hrivnak L., Czech. Journ. Phys., **9**, 439 (1959).
Потенциальная энергия взаимодействия электрона с дыркой в ионном кристалле.
2602. Hrivnak L., Czech. Journ. Phys., **9**, 685 (1959).
Стационарные состояния электрона в поле дырки в ионном кристалле.
2603. Hrivnak L., Czech. Journ. Phys., **11**, 808 (1961).
Определение ширины запрещенной зоны в некоторых полупроводниках.
2604. Hrostowski H. J., Morin F. J., Geballe T. H., Wheatley G. H., Phys. Rev., **100**, 1672 (1955). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла и проводимость в InSb.
2605. Hrostowski H. J., Bell Lab. Record, **34**, 246 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Интерметаллические полупроводники.
2606. Hrostowski H. J., Kaiser R. H., Phys. Rev., **107**, 966 (1957) (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение кислорода в кремнии.
2607. Hsieh Y. C., Journ. Chem. Phys., **22**, 306 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Колебательный спектр и теплоемкость германия и кремния.
2608. Huang K., Proc. Phys. Soc., **60**, 161 (1948). (Гл. 3, § 11.)
Квантовомеханический расчет теплоты растворения и остаточного сопротивления золота в серебре.
2609. Huang K., Proc. Roy. Soc., **A203**, 178 (1950). (Гл. 8, § 5.)
Об атомной теории упругости.
2610. Huang K., Rhys A., Proc. Roy. Soc., **A204**, 406 (1950). (Гл. 5, § 5.)
Теория поглощения света и безызлучательных переходов в F -центрах.
2611. Huang K., Nature, **167**, 779 (1951). (Гл. 8, § 3 и 5.)
Колебания решетки и оптические волны в ионных кристаллах.
2612. Huang K., Proc. Roy. Soc., **A208**, 352 (1951). (Гл. 8, § 3 и 5.)
О взаимодействии между полем излучения и ионными кристаллами.
2613. Huang K., Phil. Mag., **42**, 202 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Замечание о приближении Гильдебранда при расчете теплового давления в твердом теле.
2614. Hubbard J. C., Proc. Phys. Soc., **A67**, 1058 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Плазменные колебания в периодическом поле; однозонная теория
2615. Hubbard J. C., Proc. Phys. Soc., **A68**, 976 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Диэлектрическая теория электронных взаимодействий в твердых телах.
2616. Hubbard J. C., Proc. Roy. Soc., **A240**, 539 (1957). (Гл. 11, § 7.)
(См. перевод в сборнике: «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959, стр. 198.)
Описание коллективных движений в системе многих частиц методами теории возмущений. I.
2617. Hubbard J. C., Proc. Roy. Soc., **A243**, 336 (1957). (Гл. 11, § 7.)
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959, стр. 227.)
Описание коллективных движений в системе многих частиц методами теории возмущений. II. Корреляционная энергия свободного электронного газа.

2618. Hubbard J. C., Proc. Roy. Soc., A244, 199 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Описание коллективных движений в системе многих частиц методами теории возмущений. III. Обобщение теории на случай неоднородного газа.
(См. перевод в сборнике «Вопросы теории многих тел», ИЛ, 1959, стр. 248.)
2619. Hubbard J. C., Proc. Roy. Soc., A276, 238 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Электронная корреляция в узких энергетических зонах.
2620. Hubbard J. C., Proc. Roy. Soc., A277, 237 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Электронная корреляция в узких энергетических зонах. II. Случай вырожденной зоны.
2621. Hugenholtz N. M., Physica, 23, 481 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Теория возмущений для больших квантовых систем.
2622. Hugenholtz N. M., Pines D., Phys. Rev., 116, 489 (1959). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Энергия основного состояния и спектр возбуждений системы взаимодействующих бозонов.
2623. Hughes A. J., Callaway J., Phys. Rev., 136, A1390 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Энергетические зоны в объемноцентрированном и гексагональном натрии.
2624. Hughes D. J., Palevsky H., Kley W., Tunkelo E., Phys. Rev. Lett., 3, 91 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Исследование движения атомов в воде с помощью рассеяния холодных нейтронов.
2625. Hughes D. J. (см. [1518, 1942, 2248, 3706, 3862]).
2626. Hughes D. S., Maurette C., Journ. Appl. Phys., 27, 1184 (1956) (Гл. 8, § 5.)
Динамическая упругая модель железа, алюминия и плавленного кварца.
2627. Huld T., Staffin T., Phys. Rev., Lett., 1, 313 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Структура валентной зоны кремния.
2628. Hulliger F., Mooser E., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 283 (1963).
Электрические свойства дальтонидов аномального состава.
2629. Humphrey J. N., Petritz R. L., Phys. Rev., 105, 1192 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводимость селенида свинца; теория зависимости чувствительности от толщины пленки и коэффициентов поглощения.
2630. Humphrey J. N., Petritz R. L., Phys. Rev., 105, 1736 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводимость селенида свинца; теория механизма активации.
2631. Hung C. S., Johnson V. A., Phys. Rev., 79, 535 (1950).
Сопровождение полупроводников, содержащих как акцепторы, так и доноры.
2632. Hung C. S., Gliessman J. R., Phys. Rev., 79, 726 (1950). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Сопровождение и эффект Холла германия при низких температурах.
2633. Hung C. S., Phys. Rev., 79, 727 (1950). (Гл. 2, § 4.)
Теория сопротивления и эффекта Холла при очень низких температурах.
2634. Huntington H. B., Phys. Rev., 75, 1627 (1949).
Поверхностная энергия металла со свободными электронами.
2635. Huntington H. B., Solid State Phys., 7, 213 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные кристаллов.

2636. Hurley A. C., Lennard-Jones J. E., Pople J. A., Proc. Roy. Soc., A220, 446 (1953). (Гл. 11, § 1.)
Теория химической валентности по методу молекулярных орбит.
XVI. Теория спаренных электронов в многоатомных молекулах.
2637. Hurst R. P., Phys. Rev., 114, 746 (1959). (Гл. 6, § 2.)
Факторы когерентного атомного рассеяния для кристаллического поля гидрида лития.
2638. Hurst R. P. (см. [4903]).
2639. Hutchinson T. S., Science, 132, 643 (1960). (Гл. 3, § 9.)
Поглощение ультразвука в твердых телах.
2640. Hutner R. A., Rittner E. S., du Pre F. K., Journ. Chem. Phys., 17, 204 (1949).
О работе поляризации в ионных кристаллах типа NaCl. II. Поляризация и два соседних заряда в жесткой решетке.
2641. Hutner R. A., Rittner E. S., du Pre F. K., Philips Res. Rep., 5, 188 (1950).
Уровни Ферми в полупроводниках.
2642. Hutner R. A. (см. [1890, 4099]).
2643. Hutson A. R., Phys. Rev., 108, 222 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Исследования эффекта Холла в легированных монокристаллах окиси цинка.
2644. Hutson A. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 467 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Электронные свойства ZnO.
2645. Hwa R. C., Phys. Rev., 110, 307 (1958). (Гл. 3 § 8.)
Влияние электрон-электронных взаимодействий на циклотронный резонанс в газовых плазмах.
2646. Ichikawa Y. H., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 18, 247 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Теория коллективных колебаний электронов в твердых телах.
2647. Ichikawa Y. H., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 19, 585 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Возможное влияние размеров на плазменные колебания электронов в твердом теле.
2648. Ichikawa Y. H., Phys. Rev., 109, 653 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Характеристические энергетические потери электронов в графите.
2649. Ichimaru S., Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 520 (1965).
Расчет магнитной восприимчивости блоховских электронов в рамках диэлектрического формализма.
2650. Ichimaru H., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 15, 151 (1956).
Квантовая статистическая механика электрон-фононной системы.
2651. Ichimura H., Tanaka S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 24, 457 (1960). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена и кулоновское взаимодействие.
2652. Ichimura H., Tanaka S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 25, 315 (1961).
Квантовая статистика газа взаимодействующих электронов в сильном магнитном поле.
2653. Инденбом В. Л., Чернышева М. А., ЖЭТФ, 32, 697 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Построение термодинамического потенциала сегнетовой соли по результатам оптического исследования доменов.
2654. Ingard U., Pridmore-Vrown D. C., Journ. Acoust. Soc. Amer., 28, 367 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Рассеяние звука на звуке.
2655. Ипое М., Journ. Phys. Soc. Japan, 17, 808 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Уровни Ландау и циклотронный резонанс в графите.

2656. Иноуэ М. (см. [4701, 4895]).
2657. Иппи Т., Уемига У., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, **5**, 252, 395 (1950). (Гл. 5, § 5.)
Теория центров окраски в ионных кристаллах. I, II.
2658. Иппи Т., Уемига У., Тоюзэва У., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, **8**, 355 (1952). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Об электронной структуре *M*-центров в щелочногалогидных кристаллах.
2659. Иппи Т. (см. [2460]).
2660. Иоффе А. Ф., *ЖТФ*, **26**, 478 (1956).
Два новых применения явления Пельтье.
2661. Иоффе А. Ф., Айрапетянц С. В., Иоффе А. В., Коломоец Н. В., Стильбанс Л. С., *ДАН СССР*, **106**, 981 (1956).
О повышении эффективности полупроводниковых термопар.
2662. Иоффе А. Ф., *Изв. АН СССР, сер. физич.*, **20**, 76 (1956).
Термоэлектрические генераторы.
2663. Иоффе А. Ф., *ЖТФ*, **27**, 1153 (1957).
Некоторые задачи дальнейшего развития учения о полупроводниках.
2664. Иоффе А. Ф., *Journ. Phys. Rad.*, **18**, 209 (1957).
Два механизма движения свободных зарядов.
2665. Иоффе А. Ф., *ФТТ*, **1**, 157 (1959).
Два механизма движения свободных зарядов.
2666. Иоффе А. Ф., *ФТТ*, **1**, 160 (1959).
Два механизма теплопроводности.
2667. Иоффе А. Ф., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 6, 20 (1959).
Свойства различных полупроводников.
2668. Иоффе А. Ф. (см. [2669, 2670]).
2669. Иоффе А. В., Иоффе А. Ф., *Изв. АН СССР, сер. физич.*, **20**, 65 (1956).
Теплопроводность полупроводников.
2670. Иоффе А. В., Иоффе А. Ф., *ФТТ*, **2**, 781 (1960).
Теплопроводность твердых растворов полупроводников.
2671. Иоффе А. В. (см. [2661]).
2672. Ирие Т., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **11**, 840 (1956). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление полупроводников группы сульфида свинца. I. Измерения на природных образцах сульфида свинца.
2673. Итикава М., Тоюдэ Н., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **18**, 150 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электропроводность и постоянная Холла многокристалла CdS.
2674. Иванчик И. И., *ФТТ*, **3**, 3731 (1961).
К макроскопической теории сегнетоэлектриков. I. Свойства однодоменных кристаллов конечной толщины.
2675. Иванчик И. И., *ФТТ*, **4**, 3236 (1962). (Гл. 8, § 5.)
О критерии сегнетоэлектричества в микроскопической теории.
2676. Иванов Г. А., Попов А. М., *ФТТ*, **5**, 1428 (1963). (Гл. 3, § 11.)
О длине свободного пробега носителей тока в висмуте и его сплавах с сурьмой.
2677. Иванов Г. А., Попов А. М., *ФТТ*, **5**, 2409 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства сплавов висмут — сурьма.
2678. Иванов Г. А. (см. [2271, 2272]).
2679. Изуята Т., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, **22**, 681 (1959).
Взаимодействие электронов в очень длинных линейных сопряженных молекулах. II. Элементарные возбуждения в системе с малой шириной запрещенной зоны.

2680. Изюмов Ю. А., Физ. мет. и металловед., 7, 495 (1959).
Спектр элементарных возбуждений электронной системы одноатомного непроводящего кристалла. I. Z электронов на атом.
2681. Изюмов Ю. А., ДАН СССР, 125, 1227 (1959).
Замечание относительно формализма Гольштейна и Примакова.
2682. Изюмов Ю. А., Физ. мет. и металловед., 7, 669 (1959).
Замечание относительно формализма Гольштейна и Примакова.
2683. Jacobsen E. H., Phys. Rev., 97, 654 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Упругий спектр меди по данным о температурном диффузном рассеянии рентгеновских лучей.
2684. Jacobsen E. H., Rev. Mod. Phys., 30, 234 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Динамика решетки и тепловое диффузное рассеяние рентгеновских лучей.
2685. Jain A. L., Jaggi R., Phys. Rev., 135, A708 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Пьезогальваномагнитные эффекты в висмуте.
2686. Jaksic B., Nuovo Cimento, 8, 282 (1958).
Об интегральном уравнении Блоха при низких температурах.
2687. Jaksic B. (см. [2273]).
2688. James H. M., Phys. Rev., 76, 1602 (1949). (Приложение 2, § 1.)
Энергетические зоны и волновые функции в периодических полях.
2689. James H. M., Science, 110, 254 (1949). (Гл. 3, § 11.)
Проводимость в фотопроводящих пленках PbS.
2690. James H. M., Phys. Rev., 76, 1611 (1949). (Приложение 2, § 1.)
Электронные состояния в искаженных периодических системах.
2691. James H. M. (см. [3248, 3557]).
2692. James J. A., Milner C. J., Watts B. N., Phys. Rev., 80, 298 (1950). (Гл. 3, § 11.)
Структура пленок сульфида свинца.
2693. James R. W., Solid State Phys., 15, 53 (1963). (Гл. 6, § 3.)
Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей.
2694. Jan J. P., Solid State Phys., 5, 3 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Гальвано- и термомагнитные эффекты в металлах.
2695. Jan J. P. (см. [1159]).
2696. Janik J. A., Janik J. M., Mellor J., Palevsky H., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 1091 (1964).
Изучение молекулярных вращений в твердых телах и жидкостях с помощью неупругого рассеяния холодных нейтронов.
2697. Jansen L., Solem A. D., Phys. Rev., 104, 1291 (1956).
Молекулярная теория диэлектрической проницаемости неполярных газов.
2698. Jansen L., Phys. Rev., 112, 434 (1958).
Молекулярная теория диэлектрической проницаемости.
2699. Jansen L., Phys. Rev., 125, 1798 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Систематическая трактовка многочастичных сил в молекулярных твердых телах.
2700. Jansen L., Phys. Rev., 135, A1292 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Устойчивость кристаллов из атомов благородного газа и щелочногалоидных кристаллов в терминах трехчастичных сил. II. Кристаллы благородного газа.
2701. Jansen L., Lombardi E., Phys. Rev. Lett., 12, 11 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Устойчивость щелочногалоидных кристаллов в терминах многочастичных сил.
2702. Jansen L. (см. [3321]).

2703. Jaswal S. S., Montgomery D. J., Phys. Rev., 135, A1257 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Собственные векторы колебаний решетки и их приложения в задачах о NaCl и KCl.
2704. Jaswal S. S., Phys. Rev., 137, A302 (1965) (Гл. 8, § 5.)
Локальные колебательные моды в иодистом натрия, обусловленные замещающими дефектами другой массы.
2705. Jaunes E. T., Phys. Rev., 79, 1008 (1950). (Гл. 8, § 5.)
Смещение кислорода в BaTiO₃.
2706. Jeffrey G. A., Parry G. S., Mozzi R. L., Journ. Chem. Phys., 25, 1024 (1956).
Исследования бинарных соединений типа вюрцита. I. Структура нитрида алюминия и окиси бериллия.
2707. Jennings L. D., Chipman D. R., De Marco J. J., Phys. Rev., 135, A1612 (1964). (Гл. 6, § 2.)
Измерение фактора рассеяния меди в идеальном кристалле.
2708. Johnson V. J., Valenta M. W., Dougherty J. E., Douglass R. M., Meadows J. W., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 85 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектрические твердые растворы типа перовскита, обладающие относительно большой спонтанной поляризацией.
2709. Jones B. K., Phil. Mag., 9, 217 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поглощения ультразвука электронами в алюминии.
2710. Jones B. K. (см. [1537]).
2711. Jones H., Physica, 15, 13 (1949). (Гл. 10, § 4.)
Структурные и упругие свойства металлов.
2712. Jones H., Phil. Mag., 41, 663 (1950). (Гл. 10, § 4.)
Влияние концентрации электронов на постоянную решетки магневых твердых растворов.
2713. Jones H., Phys. Rev., 81, 149 (1951) (Гл. 2, § 4.)
Постоянная Холла полупроводников.
2714. Jones H., Proc. Phys. Soc., A68, 1191 (1955).
Термо-э. д. с. одновалентных металлов.
2715. Jones H., в книге «Handbuch der Physik», Bd. 19, Berlin, 1956, S. 227. (Приложение 1, § 1.)
Теория электропроводности и теплопроводности металлов.
2716. Jones H., Proc. Roy. Soc., A240, 321 (1957). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость металлов и сплавов при низких температурах.
2717. Jones H., Phys. Rev., 134, A958 (1964). (Гл. 1, § 4.)
Электронные теплоемкости разбавленных твердых растворов.
2718. Jones M. C., Sondheimer E. H., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 170. (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в металлах при высоких частотах.
2719. Jones M. C., Sondheimer E. H., Proc. Roy. Soc., A278, 256 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в предельном случае аномальной релаксации.
2720. Jones W., March N. H., Sampanthar S., Phys. Lett., 1, 303 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Энергия и матрица плотности Дирака для неоднородного электронного газа.
2721. Jonker G. H., van Santen J. H., Science, 109, 632 (1949). (Гл. 8, § 5.)
Свойства титаната бария в связи с его кристаллической структурой.
2722. Jonker G. H., Journ. Phys. Chem. Solids, 9, 165 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Исследование полупроводниковых свойств феррита — кобальта.

2723. Jonker G. H., *Semicond. Phys. Conf.*, Prague, 1960, New York, 1961, p. 864. (Гл. 3, § 11.)
Энергетические уровни примесей в окислах переходных металлов.
2724. Jonscher A. K., *Proc. Phys. Soc.*, **В70**, 223 (1957).
Дрейф неосновных носителей в присутствии ловушек.
2725. Jonscher A. K., *Proc. Phys. Soc.*, **В70**, 230 (1957).
Диффузия неосновных носителей в присутствии ловушек.
2726. Joseph A. S., Gordon W. L., Reitz J. R., Eck T. G., *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 334 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Наблюдение спин-орбитального расщепления в зонах цинка и кадмия.
2727. Joseph A. S., Gordon W. L., *Phys. Rev.*, **126**, 489 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в Zn в слабом поле.
2728. Joseph A. S., Thorsen A. C., *Phys. Rev. Lett.*, **11**, 554 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена и поверхность Ферми никеля.
2729. Joseph A. S., Thorsen A. C., *Phys. Rev.*, **133**, A1546 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена и поверхность Ферми рения.
2730. Joseph A. S., Thorsen A. C., *Phys. Rev.*, **134**, A979 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в меди в слабом поле.
2731. Joseph A. S., Thorsen A. C., *Phys. Rev.*, **138**, A1159 (1965). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в Ag в слабом поле.
2732. Joseph A. S. (см. [2346, 4636]).
2733. Joseph R. J., Silverman B. D., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 1349 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Оптические моды в структуре перовскита.
2734. Joshi S. K., *Journ. Chem. Phys.*, **33**, 1261 (1960).
Число $3d$ -электронов в железе.
2735. Joshi S. K., Gupta R., *Phys. Rev.*, **126**, 933 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Дисперсия фононов в AgCl.
2736. Joshi S. K., Kashyap B. M. S., *Phys. Rev.*, **126**, 936 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Электрическое и тепловое сопротивления и поверхность Ферми одновалентных металлов.
2737. Joynson R. E., *Phys. Rev.*, **94**, 851 (1954). (Гл. 8, § 1.)
Упругий спектр цинка по данным о температурном рассеянии рентгеновских лучей.
2738. Jul G. W., *Proc. Phys. Soc.* **В69**, 1237 (1956).
Экспериментальное исследование характеристических электронных энергетических потерь в твердых телах.
2739. Juretschke H. J., *Phys. Rev.*, **92**, 1140 (1953). (Гл. 11, § 7.)
Обменный потенциал в поверхностной области металла со свободными электронами.
2740. Juretschke H. J., *Acta Cryst.*, **8**, 716 (1955). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Симметрия гальваномагнитных эффектов в сурьме.
2741. Juretschke H. J., Steinitz R., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **4**, 118 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла и электропроводность диборидов переходных металлов.
2742. Juretschke H. J. (см. [1977, 1995, 2114]).

2743. Хачатурян А. Г., ФТТ, 3, 2540 (1961).
К вопросу о взаимодействии носителей тока с колебаниями решетки в анизотропном кристалле.
2744. Кадомцев Б. Б., ЖЭТФ, 33, 151 (1957). (Гл. 11, § 7.)
О действующем поле в плазме.
2745. Каепzig W., Phys. Rev., 80, 94 (1950). (Гл. 8, § 5.)
Атомные положения и колебания в решетке сегнетозлектрического BaTiO_3 .
2746. Каепzig W., Solid State Phys., 4, 1 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Сегнетозлектрики и антисегнетозлектрики.
2747. Каепzig W., Woodruff T. O., Jour. Phys. Chem. Solids, 9, 70 (1959).
Электронная структура H -центра.
2748. Каган Ю., ЖЭТФ, 38, 1854 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в германии и кремнии и роль отрицательных эффективных масс.
2749. Каганов М. И., Азбель М. Я., ДАН СССР, 102, 49 (1955). (Гл. 5, § 1.)
К теории аномального скин-эффекта.
2750. Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В., ЖЭТФ, 31, 232 (1956).
Релаксация между электронами и решеткой.
2751. Каганов М. И., Слезов В. В., ЖЭТФ, 32, 1496 (1957). (Гл. 5, § 1.)
Поверхностный импеданс металлов в инфракрасной области.
2752. Каганов М. И., Песчанский В. Г., ЖЭТФ, 35, 1052 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные явления в металлах с почти равными числами электронов и «дырок».
2753. Каганов М. И. (см. [940, 1044, 1135, 3286, 3289, 3297, 3302]).
2754. Каhn A. H., Kittel C., Phys. Rev., 89, 315 (1953). (Гл. 3, § 11.)
Волновые функции F -центров и электронные g -факторы в кристаллах KCl .
2755. Каhn A. H., Phys. Rev., 97, 1647 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Теория инфракрасного поглощения носителей в германии и кремнии.
2756. Каhn A. H., Frederikse H. P. R., Solid State Phys., 9, 257 (1959). (Гл. 3, § 10.)
Осцилляции магнитной восприимчивости и электропроводности.
2757. Каhn A. H., Phys. Rev., 119, 1189 (1960).
Рассеяние электронов в сильном магнитном поле.
2758. Каhn A. H., Leuendecker A. J., Phys. Rev., 135, A1321 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Энергетические зоны в титанате стронция.
2759. Каhn A. H. (см. [4628]).
2760. Калашников С. Г., ЖТФ, 26, 241 (1956).
Рекомбинация электронов и дырок при наличии ловушек разного типа.
2761. Каллманн Н., Freeman J. R., Phys. Rev., 109, 1506 (1958).
Распределение электрического поля в поляризованных фотопроводниках.
2762. Каллманн Н., Pore M., Nature, 185, 753 (1960).
Объемная проводимость органических полупроводников, контролируемая поверхностью.
2763. Каллманн Н., Pore M., Nature, 186, 31 (1960).
Объемная проводимость органических кристаллов.

2764. Камбе К., *Jourн. Phys. Soc. Japan*, 12, 13, 25 (1957).
Исследование одновременного отражения при дифракции электронов на кристаллах. I. Теоретическое рассмотрение. II. Экспериментальное подтверждение.
2765. Камитига Н., *Phys. Rev.*, 129, 614 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Правила отбора для циклотронного резонанса дырок в германии и кремнии.
2766. Камт G. N., Вохт Н. V., *Phys. Rev.*, 131, 111 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетоакустические измерения поверхности Ферми алюминия.
2767. Капай Y., Нии R., *Jourн. Phys. Soc. Japan*, 12, 125 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства германия, легированного никелем, при низких температурах.
2768. Капай Y., Нии R., Watabe N., *Jourн. Phys. Soc. Japan*, 15, 1717 (1960). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления в PbTe n -типа.
2769. Капазава Н., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 13, 227 (1955). (Гл. 11, § 7.)
К теории плазменных колебаний в металлах.
2770. Капазава Н., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 15, 273 (1956); II, 17, 1 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Кулоновские взаимодействия и диамагнетизм свободных электронов.
2771. Капазава Н., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 17, 304 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Замечание о преобразовании Блоха — Нордсека и о взаимодействии электронов с фононами.
2772. Капазава Н., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 18, 287 (1957). (Гл. 11, § 7.)
О дополнительных условиях в теории электронной плазмы по Бому и Пайнсу.
2773. Капазава Н., Matsudaira N., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 22, 463 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Диамагнетизм плотного электронного газа.
2774. Капазава Н., Watabe M., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 23, 408 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Метод функций Грина для электронного газа. I. Общая формулировка.
2775. Капазава Н., Misawa S., Fujita E., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 23, 426 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Метод функций Грина для электронного газа. II. Дисперсионное уравнение для плазмонов.
2776. Капазава Н., Matsudaira N., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, 23, 433 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Метод функций Грина для электронного газа. III. Диамагнетизм
2777. Капазава К. К., Brown F. C., *Phys. Rev.*, 135, A1757 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в теллуриде кадмия.
2778. Капе Е. О., *Jourн. Phys. Chem. Solids*, 6, 236 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Влияние обмена на формализм эффективной массы.
2779. Капе Е. О., *Jourн. Phys. Chem. Solids*, 12, 181 (1960).
Зинеровское туннелирование в полупроводниках.
2780. Капе Е. О., *Phys. Rev.*, 125, 1094 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Спектральные моменты и теория возмущений в непрерывном спектре.

2781. Капе Е. О., Phys. Rev., 131, 79 (1963). (Гл. 10, § 1.)
Приближение Томаса — Ферми в задаче о зонной структуре примесного полупроводника.
2782. Капе Е. О., Phys. Rev., 131, 1532 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Метод возмущений и моментов; приложение к исследованию зонной структуры примесных полупроводников.
2783. Капе Е. О., Phys. Rev. Lett., 12, 97 (1964).
Вывод о сохранении квазимпульса при внешнем фотоэффекте, вытекающий из измерений зонной структуры.
2784. Канер Э. А., Каганов М. И., ЖЭТФ, 31, 459 (1956).
К вопросу о возможности введения эффективной диэлектрической постоянной на высоких частотах.
2785. Канер Э. А., ЖЭТФ, 33, 544 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в плазме.
2786. Канер Э. А., Азбель М. Ю., ЖЭТФ, 33, 1461 (1957). (Гл. 3, § 8.)
К теории циклотронного резонанса в металлах.
2787. Канер Э. А., ЖЭТФ, 33, 1472 (1957). (Гл. 3, § 8.)
К теории циклотронного резонанса.
2788. Канер Э. А., ЖЭТФ, 34, 658 (1958). (Гл. 2, § 4.)
О теории гальваномагнитных и термомагнитных эффектов в металлических пленках.
2789. Канер Э. А., ДАН СССР, 119, 471 (1958). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в пленках.
2790. Канер Э. А., ЖЭТФ, 35, 962 (1958). (Гл. 3, § 8.)
О некоторых особенностях циклотронного резонанса в металлах с невыпуклой поверхностью Ферми.
2791. Канер Э. А., ЖЭТФ, 38, 212 (1960); 39, 1071 (1960). (Гл. 3, § 9.)
К теории поглощения ультразвука металлами в сильном магнитном поле. I, II.
2792. Канер Э. А., Песчанский В. Г., Привороцкий И. А., ЖЭТФ, 40, 214 (1961). (Гл. 3, § 9.)
К теории магнетоакустического резонанса в металлах.
2793. Канер Э. А., ЖЭТФ, 43, 216 (1962). (Гл. 3, § 9.)
Теория акустического циклотронного резонанса в металлах.
2794. Канер Э. А., Набутовский В. М., ФТТ, 4, 685 (1962).
О влиянии слабо неоднородного магнитного поля на резонансные явления в металлах.
2795. Канер Э. А., ЖЭТФ, 44, 1036 (1963).
Об аномальном проникновении электромагнитного поля в металл.
2796. Канер Э. А. (см. [1041—1043, 1049, 1051, 2192]).
2797. Капзак И., Journ. Phys. Chem. Solids, 2, 24, 107 (1957).
Точечные дефекты в гранецентрированной кубической решетке. I. Искажения решетки около дефектов. II. Рассеяние рентгеновских лучей.
2798. Као L. P., Katz E., Journ. Phys. Chem. Solids, 6, 223 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Феноменологическая теория анизотропных изотермических гальваномагнитных эффектов.
2799. Као Y. H., Phys. Rev., 129, 1122 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Исследование поверхности Ферми в Bi с помощью циклотронного резонанса.
2800. Као Y. H., Brown R. D., III, Hartman R. L., Phys. Rev., 136, A858 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Шубникова — де Гааза и циклотронный резонанс в разбавленном сплаве Bi—Sb.

2801. Капица М. Л., Фредрихов С. А., Шульман А. Р., ФТТ, 2, 517 (1960).
Характеристические потери энергии при отражении электронов от монокристаллов щелочногалогидных соединений.
2802. Карлап Н., Phys. Rev., 125, 1905 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Замечания о моделях с силовыми постоянными в динамике решетки.
2803. Карлап Н., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 1593 (1963).
Примесные состояния, связанные с дополнительными минимумами энергетической зоны.
2804. Карлап J. I., Phys. Rev., 99, 1808 (1955).
Термомангнитная анизотропия.
2805. Каплунова Е. И., Толпыго К. Б., ЖТФ, 27, 2246 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Температурная зависимость коэффициента Холла в полупроводниках с постоянной концентрацией носителей.
2806. Караваев Г. Ф., Кудрявцева Н. В., Чалдышев В. А., ФТТ, 4, 3471 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Структура энергетического спектра электронов в кристаллах типа Th_3P_4 .
2807. Каго А. М., Journ. Chem. Phys., 31, 1489 (1959); 33, 7 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки щелочногалогидных кристаллов. I. Галоиды лития и натрия. II. Галоиды калия и рубидия. Фтористый цезий.
2808. Каго А. М., Nagdy J. R., Phys. Rev., 129, 2024 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки и данные по теплоемкости для щелочных галогидов со структурой сегнетовой соли.
2809. Каго А. М. (см. [2468]).
2810. Кагплус М., Watson К. М., Phys. Rev., 107, 1205 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Структура многочастичной квантовомеханической среды.
2811. Карпус А. С., Батарунас И. В., Литовск. физ. сборник, 1, 315 (1961). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о сложной зонной структуре полупроводников типа Sb_2S_3 .
2812. Касchlup F., Ann. Phys., 19, 94 (1956). (Гл. 1, § 4.)
О теплоемкости электронов в металле.
2813. Кашеев В. Н., Кривоглаз М. А., ФТТ, 3, 3167, (1961).
Теория неупругого рассеяния нейтронов на примесных центрах в кристаллах.
2814. Кашеев В. Н., ФТТ, 5, 1358 (1963). (Гл. 8, § 5.)
К теории инфракрасного поглощения света в кристаллах с учетом трехфононного взаимодействия.
2815. Кашеев В. Н., ФТТ, 5, 2339 (1963). (Гл. 8, § 5.)
К теории инфракрасного поглощения света в кристаллах. Четырехфононное взаимодействие.
2816. Kashiwase Y., Kaiputa Y., Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 461 (1965). (Гл. 8, § 1.)
Исследование колебаний решетки КВг с помощью измерения диффузного рассеяния рентгеновских лучей.
2817. Kasuya T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 13, 561 (1955). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5.)
О теории теплопроводности одновалентных металлов.
2818. Kasuya T., Journ. Phys. Soc. Japan, 13, 1096 (1958).
Теория примесной проводимости. I.
2819. Kasuya T., Journ. Phys. Soc. Japan, 14, 410 (1959).
Общая теория явлений переноса; различие между электрическим полем и градиентом концентрации.

2820. Kasuya T., Yamada K., Journ. Phys. Soc. Japan, 14, 416 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Электропроводность и теплопроводность одновалентных металлов; влияние кулоновского взаимодействия.
2821. Катана П. М., ФТТ, 4, 1710 (1962).
Многочастичные квантовые функции Грина в теории многофононных переходов.
2822. Kato N., Acta Cryst., 13, 349 (1960).
Поток энергий рентгеновских лучей в идеальном кристалле; сравнение теории с экспериментом.
2823. Katz E., Journ. Chem. Phys., 19, 488 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Замечание о колебательных спектрах простых твердых тел по данным о теплоемкости.
2824. Katz E. (см. [2798]).
2825. Katz J. I., Rice S. A., Choi Sang-il, Kortner J., Journ. Chem. Phys., 39, 1683 (1963). (Гл. 3, § 11.)
О зонных структурах лишних электронов и дырок и о подвижности носителей в нафталине, антраcene и в некоторых полифенилах.
2826. Katzin L. I., Journ. Chem. Phys., 23, 2055 (1955). (Гл. 5, § 5.)
Регулярности в спектрах поглощения галоидов.
2827. Ka us P. E., Phys. Rev., 109, 1944 (1958).
Теория состояний, связанных с внедренными примесями в полупроводниках.
2828. Ka us P. E., Phys. Rev. Lett., 3, 20 (1950).
Роль отрицательной эффективной массы в отрицательном сопротивлении.
2829. Ka us P. E., Watson W. K. R., Phys. Rev., 120, 44 (1960).
Дисперсионные соотношения для блоховских волн.
2830. Kawamura H., Journ. Phys. Chem. Solids, 5, 256 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Потенциал деформации в хлористом калии.
2831. Kawamura H., Fukai M., Imai U., Tomishima K., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 629. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс горячих электронов в германии.
2832. Kawamura H., Saji H., Fukai M., Sekido K., Imai I., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 288 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Уширение линий циклотронного резонанса вследствие взаимодействия между носителями заряда в германии.
2833. Kawamura H. (см. [2163, 3799]).
2834. Keffer F., Portis A. M., Journ. Chem. Phys., 27, 675 (1957).
Исследование бинарных соединений типа вюрцита. II. Макроскопическая теория искажений и поляризации.
2835. Keffer F., Journ. Chem. Phys., 32, 62 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Исследование бинарных соединений типа вюрцита. IV. Теория двойного лучепреломления.
2836. Keffer F., Journ. Chem. Phys., 33, 1267 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Эффективный ионный заряд в CdS.
2837. Keffer F. (см. [1595]).
2838. Келдыш Л. В., ЖЭТФ, 33, 994 (1957).
О поведении немаetalлических кристаллов в сильных электрических полях.
2839. Келдыш Л. В., ЖЭТФ, 34, 962 (1958).
О влиянии колебаний решетки кристалла на рождение электронно-дырочных пар в сильном электрическом поле.
2840. Келдыш Л. В., ЖЭТФ, 34, 1138 (1958). (Гл. 5, § 5.)
О влиянии сильного электрического поля на оптические характеристики непроводящих кристаллов.

2841. Келдыш Л. В., ЖЭТФ, **37**, 713 (1959).
Кинетическая теория ударной ионизации в полупроводниках.
2842. Келдыш Л. В., ФТТ, **4**, 2265 (1962).
О влиянии ультразвука на электронный спектр кристалла.
2843. Келдыш Л. В., Копаев Ю. В., ФТТ, **5**, 1411 (1963).
Энергетический спектр вырожденного полупроводника с ионной решеткой.
2844. Keller R. A., Journ. Chem. Phys., **38**, 1076 (1963).
Электронная проводимость молекулярных кристаллов; альтернатива методу Блоха.
2845. Kelley P. L., Journ. Phys. Chem. Solids, **24**, 607 (1963).
Нелинейные эффекты в твердых телах.
2846. Kelly D. C., Margenau H., Brown S. C., Phys. Rev., **108**, 1367 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс; метод определения сечений столкновения для электронов низких энергий.
2847. Kelly H. P., Phys. Rev., **131**, 684 (1963). (Гл. 10, § 6; гл. 11, § 7.)
Корреляционные эффекты в атомах.
2848. Kelly H. P., Sessler A. M., Phys. Rev., **132**, 2091 (1963). (Гл. 10, § 6; гл. 11, § 7.)
Корреляционные эффекты в многофермионных системах; разложение по многочастичным возбуждениям.
2849. Kelly H. P., Phys. Rev., **134**, A1450 (1964). (Гл. 10, § 6; гл. 11, § 7.)
Корреляционные эффекты в многофермионных системах. II. Связанные группы.
2850. Kelly H. P., Phys. Rev., **136**, B896 (1964). (Гл. 10, § 6; гл. 11, § 7.)
Многочастичная теория возмущений в приложении к атомам.
2851. Kemmey P. J., Mitchell E. W. J., Proc. Roy. Soc., **A263**, 420 (1961). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление полупроводникового алмаза *p*-типа.
2852. Kemp J. C., Neeley V. I., Phys. Rev., **132**, 215 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Волновые функции *F*-центров в MgO.
2853. Kemp W. R. G., Klemens P. G., Sreedhar A. K., White G. K., Proc. Roy. Soc., **A233**, 480 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность и электропроводность серебряно-палладиевых и серебряно-кадмиевых сплавов при низких температурах.
2854. Kemp W. R. G., Klemens P. G., Tainish R. J., Australian Journ. Phys., **10**, 454 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Решеточная теплопроводность некоторых медных сплавов.
2855. Kemp W. R. G. (см. [1231, 2477]).
2856. Kestner N. R., Sinapoglu O., Phys. Rev., **128**, 2687 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Исследование корреляций в гелиеподобных системах с помощью точно решаемой модели.
2857. Kestner N. R., Sinapoglu O., Journ. Chem. Phys., **38**, 1730 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Эффективные межмолекулярные парные потенциалы в неполярных средах.
2858. Ketterson J. B., Phys. Rev., **129**, 18 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поглощение в сурьме ультразвука. II. Осцилляции де Гааза — ван Альфена.
2859. Ketterson J. B., Eckstein Y., Phys. Rev., **132**, 1885 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — Шубникова в сурьме.
2860. Ketterson J. B. (см. [1910, 1911]).

2861. Keyes R. J., Zwerdling S., Foner S., Kolm H. H., Lax V., Phys. Rev., 104, 1804 (1956). (Гл. 2, § 7; гл. 3, § 8 и 11.)
Инфракрасный циклотронный резонанс в Bi, InSb и InAs в сильных импульсных магнитных полях.
2862. Keyes R. J. (см. [3199, 3201, 4970]).
2863. Keyes R. W., Phys. Rev., 104, 665 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Пьезосопротивление висмута.
2864. Keyes R. W., Phys. Rev., 109, 43 (1958). (Гл. 3, § 10.)
Изотропное приближение в теории магнетосопротивления много-
долинного полупроводника.
2865. Keyes R. W., Phys. Rev., 111, 34 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Интерпретация магнетосопротивления в германии и кремнии *n*-типа.
2866. Keyes R. W., Journ. Chem. Phys., 29, 467 (1958).
Активационные объемы для диффузии в твердых телах.
2867. Keyes R. W., Journ. Phys. Chem. Solids, 6, 1 (1958).
Влияние электрон-электронного рассеяния на электрические свой-
ства полупроводников.
2668. Keyes R. W., Phys. Rev., 115, 564 (1959).
Высокотемпературная теплопроводность изолирующих кристаллов;
связь с точкой плавления.
2869. Keyes R. W., Solid State Phys., 11, 149 (1960).
Влияние упругой деформации на электропроводность полупровод-
ников.
2870. Keyes R. W., IBM Journ. Res. Developm., 6, 65 (1961).
Водородоподобные примесные состояния в аксиально-симметричных
кристаллах.
2871. Keyes R. W. (см. [912, 4351]).
2872. Хайкин М. С., ЖЭТФ, 37, 1473 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс на олове.
2873. Хайкин М. С., ЖЭТФ, 39, 513 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
К вопросу о циклотронном резонансе на олове.
2874. Хайкин М. С., ЖЭТФ, 41, 1773 (1961).
Прямое измерение импульса электронов проводимости металла.
2875. Хайкин М. С., Мина Р. Т., ЖЭТФ, 42, 35 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Исследование поверхности Ферми свинца методом циклотронного
резонанса.
2876. Хайкин М. С., ЖЭТФ, 43, 59 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Исследование формы одного сечения поверхности Ферми олова.
2877. Хайкин М. С., Мина Р. Т., Эдельман В. С., ЖЭТФ, 43, 2063
(1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс и квантовые осцилляции поверхностного
сопротивления висмута.
2878. Харциев В. Е., ЖЭТФ, 27, 1713 (1957).
О простых методах исследования зонной структуры некоторых полу-
проводниковых соединений.
2879. Харциев В. Е., ФТТ, 4, 983 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Исследование симметрии энергетических зон соединений CdSb и
ZnSb.
2880. Хуцшвили Г. Р., ЖЭТФ, 35, 1031 (1958).
Об эффекте Оверхаузера в неметаллах. II.
2881. Холоденко Л. П., ЖЭТФ, 31, 244 (1956). (Гл. 8, § 5.)
К термодинамической теории сегнетоэлектрических свойств тита-
ната бария.
2882. Kihage T., Kōha S., Journ. Phys. Soc. Jap., 14, 247 (1957).
Модель состояния молекул в кристаллах, основанная на представ-
лении о выпуклой-сердцевине.

2883. Kihara T. (см. [3573]).
2884. Kinase W., Takahashi H., Journ. Phys. Soc. Japan, 10, 942 (1955). (Гл. 8, § 5)
Теория спонтанной деформации титаната бария.
2885. Kinase W., Ishibashi Y., Matsuura K., Journ. Phys. Soc., Japan, 19, 264 (1964). (Гл. 8, § 5)
О колебаниях решетки кубического BaTiO_3 .
2886. Kinase W., Ishibashi Y., Kugašawa Y., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 273 (1964). (Гл. 8, § 5)
О сегнетоэлектричестве и антисегнетоэлектричестве кристалла типа AO_3 .
2887. Kindig N. B., Spicer W. E., Phys. Rev., 138, A561 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура сульфида кадмия; исследование с помощью внешнего фотоэффекта.
2888. King H. W., Massalski T. B., Phil. Mag., 6, 669 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Соотношение между постоянной решетки и электронной структурой плотно упакованной гексагональной фазы, основанной на серебре.
2889. King H. W. (см. [3518]).
2890. Kingston A. E., Phys. Rev., 135, A1018 (1964). (Приложение 5, § 7.)
Силы Ван дер Ваальса в инертных газах.
2891. Kingston R. H., Journ. Appl. Phys., 27, 101 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Обзор поверхностных явлений в германии.
2892. Kir A. F., Langenberg D. N., Rosenblum B., Wagoner G., Phys. Rev., 108, 494 (1957). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в олове.
2893. Kir A. F. в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 146. (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в металлах, эксперимент.
2894. Kir A. F., Contemp. Phys., 1, 355 (1960). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в твердых телах.
2895. Kir A. F., Langenberg D. N., Moore T. W., Phys. Rev., 124, 359 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в меди.
2896. Kir A. F. (см. [1788, 1860—1863, 1865, 1866, 2374, 2375]).
2897. Kirsch J., Miller P. B., Phys. Rev. Lett., 9, 421 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Допплеровское смещение частоты циклотронного резонанса и затухание альфеновских волн в висмуте.
2898. Kirsch J., Phys. Rev., 133, A1390 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Допплеровское смещение частоты циклотронного резонанса и затухание альфеновских волн в висмуте.
2899. Киржниц Д. А., ЖЭТФ, 34, 1625 (1958). (Гл. 11, § 7.)
О поведении функции распределения системы многих частиц вблизи поверхности Ферми.
2900. Киржниц Д. А., ЖЭТФ, 35, 1198 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Корреляционная энергия неоднородного электронного газа.
2901. Kittel C., Journ. Chem. Phys., 16, 850 (1948). (Гл. 8, § 5.)
Замечание о корреляции между модулем сжимаемости и коэффициентом теплового расширения KBr при низких температурах согласно теории ангармонических сил.
2902. Kittel C., Phys. Rev., 82, 729 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Теория антисегнетоэлектрических кристаллов.
2903. Kittel C., Phys. Rev., 83, 458 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Движение доменных границ в сегнетоэлектрических кристаллах и диэлектрическая проницаемость на высокой частоте.

2904. Kittel C., *Physica*, **20**, 829 (1954). (Гл. 3, § 11.)
Экспериментальные данные по зонной структуре германия и кремния.
2905. Kittel C., Proc. 10th Solvay Conf., Brussels, 1954, p. 159.
Резонансные опыты и волновые функции электронов в металлах.
2906. Kittel C., *Phys. Rev.*, **108**, 1097 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Предложение Дорфмана относительно циклотронного резонанса в ферромагнитных веществах.
2907. Kittel C., *Nuovo Cimento, Suppl.*, **6**, 1140 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в кристаллах.
2908. Kittel C., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **45**, 744 (1959).
Поглощение энергии заряженными носителями с отрицательной эффективной массой в кристаллах.
2909. Kittel C., *Phys. Rev. Lett.*, **10**, 339 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Внутреннее магнитное поле в эффекте де Гааза — ван Альфена в железе.
2910. Kittel C. (см. [1860—1863, 1865, 2754]).
2911. Kjeldaas T., Jr., Kohn W., *Phys. Rev.*, **105**, 806 (1957).
Теория диамагнетизма блоховских электронов.
2912. Kjeldaas T., Jr., *Phys. Rev.*, **113**, 1473 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Теория ультразвукового циклотронного резонанса в металлах при низких температурах.
2913. Kjeldaas T., Jr., Holstein T., *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 340 (1959). (Гл. 3, § 9.)
Осцилляционный магнетоакустический эффект в металлах.
2914. Klauder J. R., Kunzler J. E., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 125. (Гл. 3, § 10 и 11.)
Открытые орбиты высшего порядка и интерпретация данных по магнетосопротивлению и эффекту Холла для меди.
2915. Klauder J. R., Kunzler J. E., *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 179 (1961). (Гл. 3, § 10.)
Четное-поперечное напряжение: гальваномагнитный эффект в высоких полях, связанный с открытыми орбитами в металлах.
2916. Klauder J. R., Kunzler J. E., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **18**, 256 (1961). (Гл. 3, § 10.)
О топологии поверхности Ферми в металлах и об открытых орбитах по данным о магнетосопротивлении и эффекту Холла.
2917. Klauder J. R., *Ann. Phys.*, **14**, 43 (1961).
Изменение электронных энергетических уровней примесными атомами.
2918. Klauder J. R., *Bell System Techn. Journ.*, **40**, 1349 (1961). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Расчет постоянных Холла в металле: топологические аспекты и приложение к меди.
2919. Klauder J. R. (см. [3130]).
2920. Klein A., Prange R., *Phys. Rev.*, **112**, 994 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Теория возмущений для бесконечной среды фермионов.
(См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», № 3, ИЛ, 1959.)
2921. Klein A., *Phys. Rev.*, **115**, 1136 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Многочастичный подход к одноэлектронной задаче в диэлектриках и полупроводниках.
2922. Klein A. (см. [1686]).
2923. Klein C. A., *Journ. Appl. Phys.*, **33**, 3338 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Пиролитические графиты; их описание как полуметаллических молекулярных твердых тел.

2924. Klein M. V., Phys. Rev., **131**, 1500 (1963). (Гл. 3, § 5.)
 Рассеяние фононов дефектами решетки.
2925. Kleiner W., Phys. Rev., **97**, 1722 (1955). (Гл. 3, § 11.)
 Возбужденные донорные уровни в кремнии.
2926. Kleiner W., Roth L. M., Phys. Rev. Lett., **2**, 334 (1959). (Гл. 3, § 11.)
 Потенциал деформации в германии по данным о поглощении с образованием экситонов.
2927. Kleiner W. (см. [4977]).
2928. Kleinman D. A., Spitzer W. G., Phys. Rev., **118**, 110 (1960). (Гл. 8, § 5.)
 Инфракрасное поглощение в решетке GaP.
2929. Kleinman D. A., Phys. Rev., **118**, 118 (1960). (Гл. 8, § 5.)
 Ангармонические силы в кристалле GaP.
2930. Kleinman L., Phys. Rev., **128**, 2614 (1962). (Гл. 3, § 11.)
 Потенциалы деформации в Si. I. Одноосное растяжение или сжатие.
2931. Kleinman L., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 552.
 Ковалентная связь в полупроводниках.
2932. Kleinman L., Phys. Rev. **130**, 2283 (1963). (Гл. 3, § 11.)
 Потенциалы деформации в кремнии. II. Гидростатическое напряжение и электрон-фононное взаимодействие.
2933. Kleinman L. (см. [2351]).
2934. Klempers P. G., Proc. Phys. Soc., **A68**, 1113 (1955). (Гл. 8, § 5.)
 Рассеяние низкочастотных волн решетки статическими дефектами.
2935. Klempers P. G., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **16**, 154 (1956). (Гл. 8, § 5.)
 К теории теплопроводности чистых металлов при низких температурах.
2936. Klempers P. G., Canad. Journ. Phys., **34**, 1212 (1956). (Гл. 8, § 5.)
 Электрическое сопротивление, обусловленное дефектами решетки металлов.
2937. Klempers P. G., в книге «Handbuch der Physik», Bd. 14, Berlin, 1956, S. 198. (Гл. 8, § 5.)
 Теплопроводность твердых тел при низких температурах.
2938. Klempers P. G., Canad. Journ. Phys., **35**, 441 (1957). (Гл. 8, § 5.)
 Некоторые задачи рассеяния в теории проводимости.
2939. Klempers P. G., Proc. Phys. Soc., **A70**, 833 (1957). (Гл. 8, § 5.)
 Тепловое сопротивление, обусловленное изотопическим изменением массы.
2940. Klempers P. G., Solid State Phys., **7**, 1 (1958). (Гл. 8, § 5.)
 Теплопроводность и моды колебаний решетки.
2941. Klempers P. G., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 345, 361 (1959). (Гл. 8, § 5.)
 Тепловое сопротивление, обусловленное изотопами и другими точечными дефектами.
2942. Klempers P. G., Australian Journ. Phys., **12**, 199 (1959). (Гл. 8, § 5.)
 Отклонение от правила Матиссена и решеточная теплопроводность сплавов.
2943. Klempers P. G., Phys. Rev., **122**, 443 (1961). (Гл. 8, § 5.)
 Ангармоническое затухание локализованных колебаний решетки.
2944. Klempers P. G., Phys. Rev., **125**, 1795 (1962). (Гл. 8, § 5.)
 Локализованные моды и спин-решеточные взаимодействия.
2945. Klempers P. G. (см. [1331, 2477, 2853, 2854, 3081]).
2946. Klempereger O., Shepherd J. P. G., Adv. Phys., **12**, 355 (1963). (Гл. 5, § 3.)
 Характеристические энергетические потери электронов в твердых телах.

2947. Klick C. S., Mauger R., Phys. Rev., 81, 124 (1951). (Гл. 3, § 11.)
Подвижность электронов в алмазе.
2948. Климонтович Ю. Л., Темко С. В., ЖЭТФ, 33, 132 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Квантовое кинетическое уравнение для плазмы с учетом корреляции.
2949. Климонтович Ю. Л., Темко С. В., ЖЭТФ, 35, 1141 (1958).
О кинетических уравнениях для систем частиц, взаимодействующих с колебаниями решетки.
2950. Клингер М. И., ЖЭТФ, 29, 439 (1955). (Гл. 2, § 4.)
К теории эффекта Холла в ионных полупроводниках.
2951. Клингер М. И., ЖЭТФ, 31, 1055 (1956). (Гл. 2, § 4.)
К теории гальваномагнитных явлений в полупроводниках.
2952. Клингер М. И., Чабан М. М., ЖТФ, 26, 938 (1956).
К вопросу об эффекте Фарадея в полупроводниках.
2953. Клингер М. И., ЖТФ, 26, 2185 (1956). (Гл. 2, § 4.)
К теории эффектов Холла и Нернста в полупроводнике с примесной зоной.
2954. Клингер М. И., ЖТФ, 27, 1915, 1919 (1957).
К вопросу о низкотемпературных аномалиях в примесных полупроводниках.
2955. Клингер М. И., Воронюк П. И., ЖТФ, 27, 1609 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные явления в монокристалле Ge и Si *n*-типа при сильных магнитных полях.
2956. Клингер М. И., Зозуля Ю. И., ЖТФ, 27, 2285 (1957).
К теории полупроводников с возбужденной примесной зоной.
2957. Клингер М. И., ЖТФ, 27, 2780 (1957).
К теории явлений переноса.
2958. Клингер М. И., Воронюк П. И., ЖЭТФ, 33, 77 (1957). (Гл. 3, § 1 и 11.)
Гальваномагнитные явления при сильных магнитных полях в полупроводниках типа *n*-Ge.
2959. Клингер М. И., ЖЭТФ, 33, 379 (1957).
Магнитная восприимчивость полупроводника с примесной зоной в сильном магнитном поле.
2960. Клингер М. И., Макарычева Г. А., ЖТФ, 28, 264 (1958).
К теории полупроводников с возбужденной примесной зоной.
2961. Клингер М. И., ФТТ, 1, 861 (1959).
К статистической теории электропроводности полупроводников. I.
2962. Клингер М. И., ФТТ, 1, 1225 (1959).
К статистической теории кинетических явлений. II.
2963. Клингер М. И., ФТТ, 1, 1385 (1959).
К статистической теории электропроводности полупроводников. III.
2964. Клингер М. И., ФТТ, 3, 1342 (1961).
К теории линейных необратимых процессов в сильном магнитном поле.
2965. Клингер М. И., ФТТ, 4, 3075, 3086 (1962).
Теория явлений переноса в полупроводниках с малой подвижностью. I, II.
2966. Клингер М. И., ДАН СССР, 150, 289 (1963).
Теория явлений низкотемпературного переноса в полупроводниках с малой подвижностью. I, II.
2967. Клингер М. И. (см. [4188, 4192]).
2968. Клячкин В. И., ФТТ, 1, 1874 (1959). (Гл. 8, § 5.)
К теории сегнето- и антисегнетоэлектриков.

2969. Клячкин В. И., ФТТ, 2, 1390 (1960). (Гл. 8, § 5.)
К теории ориентационного упорядочения дипольных кристаллов.
2970. Кпох R. S., Dexter D. L., Phys. Rev., 104, 1245 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Теория люминесценции твердого тела и силы осцилляторов в KCl:Ti.
2971. Кпох R. S., Phys. Rev. Lett., 2, 87 (1959).
Инверсионная симметрия M -центра.
2972. Кпох R. S., Phys. Rev., 115, 1095 (1959): (Гл. 3, § 11.)
Конфигурационное взаимодействие в щелочногалогидных фосфорах.
2973. Кпох R. S., Phys. Rev., 133, A498 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Возбужденные состояния в кристаллах галогидов цезия.
2974. Кпох R. S., Phys. Rev., 135, A166 (1964).
Атомные мультипольные взаимодействия в кристаллах инертных газов.
2975. Кпох R. S. (см. [1138, 1699, 4120]).
2976. Коба S., Journ. Phys. Soc. Japan, 16, 627 (1961).
Модель состояния молекулы в кристаллах, основанная на представлении о выпуклой сердцевине. II.
2977. Кобелев Л. Я., Физ. мет. и металлвед., 6, 750 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Об учете корреляции в системе частиц с помощью двухчастичной функции Грина.
2978. Кобелев Л. Я., Физ. мет. и металлвед., 6, 948 (1958). (Гл. 11, § 7.)
О влиянии корреляции на частоту плазменных колебаний.
2979. Кобелев Л. Я. (см. [4753]).
2980. Коч J. F., Кип A. F., Phys. Rev. Lett., 8, 473 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Азбель-канеровский резонанс в олове с магнитным полем, перпендикулярным поверхности.
2981. Коч J. F., Stradling R. A., Кип A. F., Phys. Rev., 133, A240 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Некоторые новые аспекты циклотронного резонанса в меди.
2982. Коehler T. R., Nesbet R. K., Phys. Rev., 135, A638 (1964).
Адиабатическая теория электрон-фононного взаимодействия.
2983. Кoenig S. H., Gunther-Moehr G. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 2, 268 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Низкотемпературная электропроводность германия n -типа.
2984. Кoenig S. H., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 227 (1959).
Горячие и теплые электроны. Обзор.
2985. Кoenig S. H., Brown R. D., Journ. Phys. Chem. Solids, 10, 201 (1959). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5.)
III. Тепловые колебания германия n -типа при низкой температуре.
2986. Кoenig S. H., Brown R. D., III, Schillinger W., Phys. Rev., 128, 1668 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Электропроводность германия n -типа при низких температурах.
2987. Кoenig S. H., Phys. Rev., 135, A1693 (1964).
Эффект Кона в Na и других металлах.
2988. Коган Ш. М., ФТТ, 2, 1196 (1960).
О температурных квантовых функциях Грина.
2989. Коган Ш. М., ФТТ, 4, 2474 (1962).
К теории горячих электронов в полупроводниках.
2990. Коган Ш. М. (см. [1307, 1311]).
2991. Коehler M., Zs. Phys., 128, 495 (1949).
Общая теория отклонений от правила Матиссена.
2992. Коhn W., Phys. Rev., 105, 509 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Теория эффективной массы в твердых телах с многоэлектронной точки зрения.

2993. Копп W., *Solid State Phys.*, **5**, 257 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Мелкие примесные состояния в кремнии и германии.
2994. Копп W., Luttinger J. M., *Phys. Rev.*, **108**, 590 (1957); **109**, 1892 (1958).
Квантовая теория электрических явлений переноса. I, II.
2995. Копп W., *Nuovo Cimento, Suppl.*, **7**, 713 (1958).
Мелкие примесные состояния в полупроводниках.
2996. Копп W., *Proc. Phys. Soc.*, **72**, 1147 (1958).
Теория блоховских электронов в магнитном поле.
2997. Копп W., *Phys. Rev.*, **110**, 857 (1958).
Взаимодействие заряженных частиц в диэлектрике.
2998. Копп W., *Phys. Rev.*, **115**, 1460 (1959).
Теория блоховских электронов в магнитном поле; эффективный гамильтониан.
2999. Копп W., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 45 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Движение электронов и дырок в полупроводниках с многоэлектронной точки зрения.
3000. Копп W., *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 393 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Образ поверхности Ферми в колебательном спектре металла.
3001. Копп W., Luttinger J. M., *Phys. Rev.*, **118**, 41 (1960). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Энергия основного состояния многофермионной системы.
3002. Копп W., *Phys. Rev.*, **123**, 1242 (1961). (Гл. 3, § 8 и 9.)
Циклотронный резонанс и осцилляции де Гааза—ван Альфена в газе взаимодействующих электронов.
3003. Копп W., Lumling M., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 851 (1963).
Орбитальная восприимчивость разбавленных сплавов.
3004. Копп W., *Phys. Rev.*, **133**, A171 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Теория изолирующего состояния.
3005. Копп W., Sham L. J., *Phys. Rev.*, **137**, A1697 (1965). (Гл. 11, § 7.)
Квантовые осцилляции плотности в неоднородном электронном газе.
3006. Копп W. (см. [976, 978, 2364, 2574, 2911, 3376, 3379, 4860]).
3007. Кojита T., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **12**, 908, 918 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электронные состояния F-центра во фтористом литии. I, II.
3008. Kolodziejczak J., Lax B., Nishina Y., *Phys. Rev.*, **128**, 2655 (1962).
Полуклассическая теория дисперсии внутризонных магнетооптических эффектов.
3009. Kolodziejczak J. (см. [3209, 3737]).
3010. Kolomies B. T., *Semicond. Phys. Conf.*, Prague, 1960, New York, 1961, p. 884.
Стеклообразные полупроводники.
3011. Коломоец Н. В., *ЖТФ*, **28**, 936 (1958).
О термоэлектрических свойствах некоторых соединений и сплавов с сильно вырожденным электронным газом.
3012. Коломоец Н. В., Ведерников М. В., *ФТТ*, **3**, 2735 (1961).
Термоэлектрические свойства ферромагнитных металлов и их сплавов.
3013. Komatsu K., Nagamiya T., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **6**, 438 (1951). (Гл. 1, § 4.)
Теория теплоемкости графита.
3014. Komatsu K., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **10**, 346 (1955). (Гл. 1, § 4.)
Теория теплоемкости графита.
3015. Komatsu K., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 707 (1964).
Интерпретация теплоемкостей различных графитов при очень низких температурах.

3016. Kōmiya H., Masumoto K., Fan H. Y., Phys. Rev., 133, A1679 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптические и электрические свойства и зонная структура ZnSb.
3017. Қондорский Е. И., Черемушкина А. В., Курбаниязов Н., ФТТ, 6, 539 (1964). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в ферромагнитных металлах и сплавах.
3018. Константинов О. В., Перель В. И., ЖЭТФ, 37, 786 (1959).
Квантовая теория пространственной дисперсии электрической и магнитной восприимчивостей.
3019. Конторова Т. А., ЖТФ, 26, 670 (1956).
К вопросу о рациональном определении подвижности носителей тока в полупроводниках.
3020. Конторова Т. А., ЖТФ, 27, 269 (1957).
К вопросу о рассеянии носителей тока в полупроводниках с ионным типом связи.
3021. Коопсе С. S., Phys. Rev., 134, A1625 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Расщепление акцепторных уровней в кремнии при деформации.
3022. Коренблит И. Я., ФТТ, 2, 3083 (1960). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в Bi_2Te_3 при анизотропном рассеянии.
3023. Коренблит И. Я., ФТТ, 4, 168 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные явления в полупроводниках с анизотропным рассеянием.
3024. Коренблит И. Я. (см. [2413, 4197, 4198]).
3025. Коренблит Л. Л., Шрайфельд Т. Я., ЖТФ, 25, 1019, 1182 (1955). (Гл. 2, § 4.)
К теории хорошо проводящих полупроводников. I. Равновесие электронного газа в полупроводниках. II. Электропроводность. Термо-э. д. с. Эффект Холла.
3026. Коренблит Л. Л., Машовец Д. В., Шалыт С. С., ФТТ, 6, 559 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Структура зоны проводимости и механизм рассеяния электронов в арсениде индия.
3027. Коренблит Л. Л. (см. [4187, 4191]).
3028. Kogonop U., Ann. Acad. Sci. Fennicae, AI, p. 221, 1956. (Гл. 3, § 11.)
Об искажении распределения электронов в ионах в некоторых кристаллах щелочных галоидов.
3029. Король Э. Н., Толпыго Қ. Б., ФТТ, 5, 2193 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Динамика кристаллических решеток типа ZnS с дробными переменными зарядами ионов.
3030. Корольюк А. П., Прущак Т. А., ЖЭТФ, 41, 1689 (1961). (Гл. 3, § 9.)
Новый тип квантовых осцилляций коэффициента поглощения ультразвука в цинке.
3031. Корольюк А. П., ФТТ, 5, 3323 (1963). (Гл. 3, § 11.)
«Гигантские» квантовые осцилляции коэффициента поглощения звука в висмуте.
3032. Корольюк А. П. (см. [2190—2192]).
3033. Коровин Л. И., ЖТФ, 27, 905 (1957).
Взаимодействие электрона примесного центра с акустическими колебаниями одноосного кристалла.
3034. Коровин Л. И., Фирсов Ю. А., ЖТФ, 28, 2417 (1958). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о строении дырочной зоны геллура.
3035. Коровин Л. И., ФТТ, 1, 1311 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Вычисление показателя преломления вблизи края собственного поглощения для атомных полупроводников.

3036. Коровин Л. И., Булашевич Т. Ю., ФТТ, 2, 2795 (1960). (Гл. 2, § 7; гл. 3, § 11.)
Осцилляции коэффициента поглощения в теллуре в магнитном поле, направленном вдоль оси кристалла.
3037. Коровин Л. И., ФТТ, 3, 1790 (1961).
Осцилляции показателя преломления в сильном магнитном поле в полупроводниках в области края собственного поглощения.
3038. Коровин Л. И., ФТТ, 3, 2202 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Магнетооптические спектры поглощения в полупроводниках при произвольной форме изоэнергетических поверхностей электронов. Случай замкнутых траекторий.
3039. Kogginga J., Canad. Journ. Phys., 34, 1290 (1956).
Об аномалиях сопротивления некоторых разбавленных сплавов.
3040. Kogginga J., Daunt J. A., Phys. Rev., 102, 92 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Восприимчивость и энтропия F -центров в щелочных галоидах ниже 1°K .
3041. Kogginga J., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 252 (1958).
Теория дисперсии электронов в хаотической решетке и ее применения в теории электронной структуры сплавов.
3042. Kogginga J., Physica, 24, S171 (1958).
Дисперсия электронных волн в хаотической решетке.
3043. Kogginga J., Phys. Rev., 133, A1228 (1964).
Динамический распад большой системы.
3044. Корсунский М. И., Генкин Я. Е., Изв. АН СССР, 25, 1031 (1961).
К вопросу об установлении границы Ферми по эмиссионным полосам рентгеновских спектров.
3045. Корсунский В. М., Лисица М. П., ФТТ, 2, 1619 (1960). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Инфракрасное поглощение и строение дырочной зоны теллура.
3046. Косевич А. М., Лифшиц И. М., ЖЭТФ, 29, 743 (1955). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в тонких слоях металлов.
3047. Косевич А. М., ЖЭТФ, 33, 735 (1957). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в переменном магнитном поле.
3048. Косевич А. М., ЖЭТФ, 35, 738 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в импульсных магнитных полях.
3049. Косевич А. М., Андреев В. В., ЖЭТФ, 38, 882 (1960).
О квантовом аналоге интеграла столкновений для электронов в магнитном и электрическом полях.
3050. Косевич А. М. (см. [3285, 3293, 3294]).
3051. Koshino S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 18, 23 (1957).
О взаимодействии электронов с решеткой в неполярных полупроводниках.
3052. Koster G. F., Slater J. C., Phys. Rev., 94, 1392 (1954); 95, 1167 (1954). (Приложение 2, § 1.)
Волновые функции для примесных уровней.
3053. Koster G. F., Slater J. C., Phys. Rev., 95, 1436 (1954). (Приложение 2, § 2.)
Теория рассеяния в твердых телах.
3054. Koster G. F., Slater J. C., Phys. Rev., 96, 1208 (1954). (Приложение 2, § 1.)
Упрощенный метод решения задачи о примеси.
3055. Kothari L. S., Singwi K. S., Visvanathan S., Phyl. Mag., 1, 560 (1956).

- Рассеяние холодных нейтронов в жидких металлах и энтропия разупорядочения.
3056. Коткин Г. Л., ЖЭТФ, 36, 941 (1959). (Гл. 3, § 9.)
О поглощении ультразвука в металлах.
3057. Коткин Г. Л., ЖЭТФ, 41, 281 (1961). (Гл. 3, § 9.)
К теории поглощения ультразвука металлами в магнитном поле.
3058. Ковальчик Т. Л., Маслаковец Ю. П., ЖТФ, 26, 2417 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Влияние примесей на электрические свойства теллуристого свинца.
3059. Ковалев О. В., ФТТ, 2, 1220 (1960).
Возможные изменения симметрии O_h^7 при фазовом переходе второго рода.
3060. Коварский В. А., ЖЭТФ, 33, 1445 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Безызлучательная рекомбинация электронов на примесных центрах в германии n -типа.
3061. Коварский В. А., Оптика и спектроскопия, 5, 222 (1958).
К теории безызлучательных переходов в F -центре.
3062. Ковтун Р. И., Укр. физич. журн., додаток, 2, 30 (1957).
Влияние упругих деформаций на электропроводность одновалентных металлов при высоких температурах.
3063. Козловский В. Х., ЖТФ, 26, 963 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Динамическая теория ионных решеток сегнетоэлектрических кристаллов в статических условиях.
3064. Козловский В. Х., ЖЭТФ, 30, 766 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Динамика ионных решеток сегнетоэлектрических кристаллов в предельных случаях.
3065. Козловский В. Х., ЖТФ, 27, 1395 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Об устойчивости состояний сегнетоэлектрических кристаллов.
3066. Козловский В. Х., ФТТ, 2, 1733 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Динамическая теория деформируемых ионных решеток сегнетоэлектрических кристаллов.
3067. Козловский В. Х., ФТТ, 5, 3294 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Квантовые эффекты в сегнетоэлектриках с водородными связями.
3068. Krag W. E., Brown M. C., Phys. Rev., 134, A779 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в германии n -типа.
3069. Krag W. E. (см. [1450]).
3070. Kraters H. A., Physica, 13, 401 (1947). (Гл. 5, § 3.)
Тормозная способность металла для α -частиц.
3071. Krebs H., Schottky W., из книги W. Schottky «Halbleiterprobleme», Brunswick, Germany, 1954, S. 25.
Химическая связь в полупроводниковых твердых телах.
3072. Krebs H., Zs. Anorg. Allgem. Chem., 278, 82 (1955).
Влияние гомеоплярной связи на структуру неорганических солей.
- 3072a. Krebs H., Acta Cryst., 9, 95 (1956).
II. Полупроводники и легированные фазы.
3073. Криничик Г. С., Физ. мет. и металловед., 4, 36 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура никеля и его сплавов.
3074. Krishna S., Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 566 (1965).
Плазменные колебания в магнитном поле.
3075. Krishna K. S., Nature, 166, 114 (1950). (Гл. 8, § 5.)
Ангармоничность колебаний решетки в щелочногалогенидных кристаллах.
3076. Krishna K. S., Roy S. K., Nature, 168, 869 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные щелочногалогенидных кристаллов.

3077. Krishnan K. S., Roy S. K., Proc. Roy. Soc., A207, 447 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Частоты и параметры ангармоничности нормальных колебаний щелочногалоидных кристаллов. I. Колебания решетки.
3078. Krishnan K. S., Roy S. K. Nature, 170, 159 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Поле поляризации и акустические ветви колебаний щелочногалоидных кристаллов.
3079. Krishnan K. S., Roy S. K. Proc. Roy. Soc., A210, 481 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Частоты и параметры ангармоничности нормальных колебаний щелочногалоидных кристаллов. II. Низкочастотные акустические колебания.
3080. Krishnan K. S., Roy S. K., Phil. Mag., 43, 1000 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Дисперсионные формулы и поля поляризации.
3081. Krishnan K. S., Klemens P. G., Phil. Mag., 43, 1224 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Температурная зависимость термодинамического потенциала вырожденного электронного газа.
3082. Krishnan K. S., Roy S. K., Phil. Mag., 44, 19 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Поля поляризации и резонансные частоты щелочногалоидных кристаллов.
3083. Krishnan K. S., Roy S. K., Phil. Mag., 1, 926 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Доказательство применимости дисперсионной формулы Друде к любым средам независимо от поля поляризации.
3084. Krishnan K. S., в книге «Progress in Crystal Physics», vol. 1. Thermal, Elastic, and Optical Properties, Madras, 1958. (Гл. 8, § 5.)
Тепловые, упругие и оптические свойства.
3085. Krishnan K. S., Chandrasekharan V., Rajagopal E. S., Nature, 181, 518 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Четыре упругих константы алмаза.
3086. Кристофель Н. Н., ФТГ, 4, 52 (1962). (Гл. 8, § 5.)
К теории колебаний решетки с дефектом.
3087. Кривоглаз М. А., Пекар С. И., ЖЭТФ, 31, 343 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Связь между параметрами продольных и поперечных оптических колебаний ионов в кристалле.
3088. Кривоглаз М. А., ЖЭТФ, 32, 1368 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов твердыми растворами. II. Микроскопическая теория.
3089. Кривоглаз М. А., Рыбак С. А., ЖЭТФ, 33, 139 (1957). (Гл. 8, § 5.)
К теории рассеяния света вблизи точек фазового перехода второго рода.
3090. Кривоглаз М. А., ЖЭТФ, 34, 204 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов твердыми растворами. III. Учет геометрических искажений решетки.
3091. Кривоглаз М. А., ЖЭТФ, 34, 355 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Влияние неоднородностей кристаллической решетки на термодинамику газа квазичастиц в кристалле.
3092. Кривоглаз М. А., ФТГ, 3, 2761 (1961). (Гл. 8, § 1.)
Влияние электронов проводимости на рассеяние нейтронов кристаллами.

3093. Кривоглаз М. А., ФТТ, 3, 3678 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Размытие особенностей частотных зависимостей затухания элементарных возбуждений в кристаллах.
3094. Кривоглаз М. А., ФТТ, 3, 3682 (1961). (Гл. 8, § 1.)
Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей, нейтронов и электронов ионными кристаллами, содержащими заряженные дефекты примесей.
3095. Кривоглаз М. А. (см. [1693, 2813]).
3096. Кроегер Н., RCA Rev., 18, 332 (1957).
Квазиэлектрическое и квазимагнитное поля в неоднородных полупроводниках.
3097. Kröger F. A., Vink H. J. в книге «Semiconductors and Phosphors», Brunswick, Germany, 1968, S. 17.
Введение инородных атомов в кристаллические твердые тела.
3098. Kröger F. A., Vink H. J., Journ. Phys. Chem. Solids, 5, 208 (1958).
Соотношения между концентрациями дефектов в твердых телах.
3099. Kronig R., Physica, 15, 1 (1949).
Электронная структура металлов.
3100. Kronig R., Physica, 1, 667 (1949).
Замечание к вопросу о торможении быстрых заряженных частиц в металлических проводниках.
3101. Kronig R., Phys. Rev., 86, 795 (1952). (Гл. 11, § 7.)
Коллективное описание электронных взаимодействий.
3102. Kronig R., Soppen R. K. M., Physica, 24, 432 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Расчет двойного преломления в твердом гелии.
3103. Guthansl J. A., Schwartz N., Phys. Rev., 89, 1154 (1953).
Расчет энергетических уровней F -центра.
3104. Guthansl J. A., Brooks H., Journ. Chem. Phys., 21, 1663 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Теплоемкость решетки графита.
3105. Guthansl J. A., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 343, 361 (1959).
Теплопроводность полупроводников.
3106. Guthansl J. A., Journ. Appl. Phys., 33, 307 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решеток твердых тел.
3107. Guthansl J. A. (см. [1334, 1629, 4016]).
3108. Kubo R., Journ. Phys. Soc. Japan, 3, 254 (1948); 4, 233, 326 (1949).
Взаимодействие между электронами и ионами в полупроводниках. I, II, III.
3109. Kubo R., Phys. Rev., 86, 929 (1952).
Термическая ионизация захваченных электронов.
(См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 427.)
3110. Kubo R., Canad. Journ. Phys., 34, 1274 (1956).
Общее выражение для тензора проводимости.
3111. Kubo R., Journ. Phys. Soc. Japan, 12, 570 (1957).
Статистическая механика необратимых процессов. I. Общая теория и некоторые простые приложения к задачам магнетизма и электропроводности.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961, стр. 39.)
3112. Kubo R., Yokota M., Nakajima S., Journ. Phys. Soc. Japan, 12, 1203 (1957).
Статистическая механика необратимых процессов. II. Реакция на термическое возмущение.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961, стр. 73.)

3113. Kubo R., Hasegawa H., Hashitsume N., Phys. Rev. Lett., 1, 279 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Теория гальваномагнитных эффектов в сильном магнитном поле.
3114. Kubo R., Hasegawa H., Hashitsume N., Jounp. Phys. Soc. Japan, 14, 56 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Квантовая теория гальваномагнитных эффектов. I. Обоснование теории.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961, стр. 89.)
3115. Kubo R., Jounp. Phys. Soc. Japan, 19, 2127 (1964).
Вигнеровское представление квантовых операторов и его применение к теории электронов в магнитном поле.
3116. Кучер Т. И., Толпыго К. Б., ЖЭТФ, 31, 1002 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Многэлектронное рассмотрение движения электрона (дырки) в деформированном кристалле. I.
3117. Кучер Т. И., ЖЭТФ, 32, 498 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Собственные частоты и амплитуды свободных нормальных колебаний кристалла KCl.
3118. Кучер Т. И., ЖЭТФ, 35, 1049 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Дырочные зоны в NaCl.
3119. Кучер Т. И., ФТТ, 4, 992 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Собственные частоты колебаний кремния и алмаза.
3120. Кучер Т. И., ФТТ, 4, 2385 (1962). (Гл. 8, § 5.)
О подобии кривых дисперсии собственных частот кристаллов типа алмаза.
3121. Кучер Т. И. (см. [1754]).
3122. Кудинов Е. К., ФТТ, 1, 1851 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Энергетический спектр дырок в Bi_2Te_3 .
3123. Кудинов Е. К., ФТТ, 3, 317 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Исследование дырочного спектра Bi_2Te_3 .
3124. Kuglip C. D., Ellett M. R., Cuff K. F., Phys. Rev. Lett., 6, 177 (1961). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления в PbTe n -типа.
3125. Kuglip C. D. (см. [1674, 1675]).
3126. Кйтмел Н., Zs. Phys., 143, 219 (1955).
Квантотеоретическое обоснование кинетического уравнения Больцмана.
3127. Кйтмел Н., Zs. Phys., 145, 496 (1956).
Уравнение Больцмана и термодинамика необратимых процессов.
3128. Кйтмел Н., Zs. Naturforsch., 11a, 15 (1956).
Необратимость и квантовая теория.
3129. Kupzler J. E., Hsu F. S. L., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 88.
Магнетотермические осцилляции и поверхность Ферми.
3130. Kupzler J. E., Klauder J. R., Phil. Mag., 6, 1045 (1961). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Наблюдение четырех типов анизотропии постоянной Холла в меди и их роль в определении поверхности Ферми.
3131. Kupzler J. E. (см. [1338, 2237, 2554, 2914—2916]).
3132. Курег С. Г., Proc. Phys. Soc., A69, 492 (1956). (Гл. 11, § 7.)
О теории квантовой электронной плазмы по Бому и Пайнсу.
3133. Курег С. Г. (см. [2144]).
3134. Курдиани Н. И., ФТТ, 5, 1797 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Оптические постоянные InSb в видимой и в близкой ультрафиолетовой областях спектра.

3135. Kuriyama M., Hosaya S., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 1315 (1963). (Гл. 6, § 2.)
Абсолютные измерения факторов рентгеновского рассеяния атомов марганца и кислорода в окиси марганца.
3136. Kurnick S. W., Meyer C., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 115 (1964).
Определение оптических параметров γ -фазы сульфида церия.
3137. Kurosawa T., Journ. Phys. Soc. Japan, **13**, 153 (1958).
Дефекты в ионных кристаллах. I. Усовершенствование метода Мотта и Литлтона и его применения к задачам о простых дефектах.
3138. Kurosawa T., Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, **15**, 802 (1960).
Приближение Гайтлера — Лондона в теории электропроводности.
3139. Kurosawa T., Journ. Phys. Soc. Japan, **15**, 1211 (1960).
Приближение Гайтлера — Лондона в теории электропроводности. II. Обоснование прыжкового механизма.
3140. Kurosawa T., Journ. Phys. Soc. Japan, **16**, 1298 (1961).
Поляризационные волны в твердых телах.
3141. Kurosawa T. (см. [4890, 4894, 4896]).
3142. Kurylenko S. / Cahiers Phys., **64**, 2 (1955); **66**, 17 (1956); **70**, 34 (1956).
Зоны Бриллюэна, электропроводность металлов и рентгеновские спектры поглощения K-серии.
3143. LaBahn R. W., Callaway J., Phys. Rev., **135**, A1539 (1964).
Поляризационные эффекты при упругом рассеянии электронов в гелии.
3144. Laberrigie A. App. Phys., **4**, 385 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние электронов на тепловых колебаниях атомов кристалла.
3145. Lamb J., Nick C. C., Journ. Phys. Rad., **17**, 663 (1956).
Модели центров люминесценции в сульфидах.
3146. Lampert M. A., Journ. Appl. Phys., **27**, 5 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Плазменные колебания на сверхвысоких частотах.
3147. Lampert M. A., Phys. Rev., **103**, 1648 (1956).
Упрощенная теория тока, ограниченного пространственным зарядом, в изоляторе с ловушками.
3148. Lampert M. A., Journ. Appl. Phys., **29**, 1082 (1958).
Упрощенная теория токов при монополярной проводимости с подвижностями, зависящими от поля.
3149. Lampert M. A., Herman F., Steele M. C., Phys. Rev. Lett., **2**, 394 (1959).
Роль однофононной эмиссии в пробое полупроводников при низких температурах и слабых полях.
3150. Lampert M. A., RCA Rev., **20**, 682 (1959).
Упрощенная теория распределения тока, ограниченного пространственным зарядом, в твердых телах с биполярной проводимостью.
3151. Lampert M. A. (см. [4671]).
3152. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, **30**, 1058 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Теория ферми-жидкостей.
3153. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, **34**, 262 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Свойства гриновской функции частиц в статистике.
3154. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, **35**, 97 (1958). (Гл. 11, § 7.)
К теории ферми-жидкости.
3155. Landauer R., Phys. Rev., **82**, 520 (1951).
Проводимость металлов, подвергнутых холодной обработке.
3156. Landauer R., Phil. Mag., **45**, 1216 (1954).
О взаимодействии дислокации с заряженным ионом.

3157. Landauer R., IBM Journ. Res. Developm., 1, 223 (1957).
Пространственное распределение токов и полей, обусловленное локализованными центрами рассеяния в задаче о металлической проводимости.
3158. Landsberg P. T., Proc. Phys. Soc., B69, 1056 (1956).
Дефекты с несколькими уровнями захвата в полупроводниках.
3159. Landsberg P. T., Proc. Phys. Soc., B70, 282 (1957).
К вопросу о статистике рекомбинации избыточных носителей в полупроводниках.
3160. Landsberg P. T., Proc. Phys. Soc., 71, 69 (1958).
Влияние магнитного поля на концентрацию электронов в полупроводниках.
3161. Landsberg P. T., Beattie A. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 73, 85 (1959).
Эффект Оже в полупроводниках.
3162. Landsberg P. T. (см. [1155, 1156]).
3163. Lane G. S., Huglin A. S., Stringer J., Phys. Rev., 135, A1060 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Исследования эффекта Холла в цинке и кадмии.
3164. Ланг И. Г., ФТТ, 2, 2330 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Применение метода матрицы плотности к электронам проводимости, взаимодействующим с колебаниями решетки.
3165. Ланг И. Г., ФТТ, 3, 2573 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Исследование двухфононных процессов с помощью метода матрицы плотности.
3166. Ланг И. Г. (см. [994]).
3167. Lang L. G., Hiern N. C., Phys. Rev., 110, 1062 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Распределение электронов по импульсу в монокристалле Cd.
3168. Lang W., Optik, 3, 233 (1948). (Гл. 5, § 3.)
Замедление электронов средней энергии при прохождении через тонкие металлические пленки.
3169. Langbein D., Zs. Phys., 152, 123 (1958).
Решение интегрального уравнения Блоха для электронов в металлах, находящихся в электрическом поле, в широком температурном интервале.
3170. Langbein D., Zs. Phys., 162, 542 (1961); 166, 22 (1962).
Явления электропроводности в анизотропных средах. I. Быстросходящиеся решения линейных операторных уравнений, в частности интегрального уравнения Блоха. II. Электрическое сопротивление модели с эллиптической анизотропией.
3171. Langbein D., Zs. Phys., 167, 83, 96 (1962). (Гл. 2, § 4.)
Явления электропроводности в анизотропных средах. III. Гальваномагнитные эффекты. IV. Новая модель для матричного элемента электрон-фононного взаимодействия.
3172. Langenberg D. N., Moore T. W., Phys. Rev. Lett., 3, 137 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в алюминии.
3173. Langenberg D. N., Moore T. W., Phys. Rev. Lett., 3, 328 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в меди.
3174. Langenberg D. N., Marcus S. M., Phys. Rev., 136, A1383 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс Азбеля — Канера в золоте.
3175. Langenberg D. N., Quinn J. J., Rodriguez S., Phys. Rev. Lett., 12, 104 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Гигантские квантовые осцилляции затухания поперечных акустических волн в продольном магнитном поле в металлах.

3176. Langenberg D. N. (см. [1465, 1466, 2892, 2895, 3479, 4502—4505])
3177. Langer J. S., Vosko S. H., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **12**, 196 (1960).
Экранирование статического заряда в электронном газе высокой плотности.
3178. Langer J. S., Ambegaokar V., *Phys. Rev.*, **121**, 1090 (1961).
Правило сумм Фриделя для системы взаимодействующих электронов.
3179. Lagach S., Shrader R. E., Stocker C. F., *Phys. Rev.*, **108**, 587 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Аномальная зависимость ширины запрещенной зоны от состава в сульфо- и селено-теллуридах цинка.
3180. Lasher G., Stern F., *Phys. Rev.*, **133**, A553 (1964).
Спонтанное и вынужденное рекомбинационное излучение в полупроводниках.
3181. Last J. T., *Phys. Rev.*, **105**, 1740 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Исследование инфракрасного поглощения в титанате бария и подобных материалах.
3182. Last J. T. (см. [4294]).
3183. Laval J., *Compt. Rend.*, **238**, 1773 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Атомная теория упругих свойств кристаллов без предположения о центральных силах.
3184. Laval J., *Compt. Rend.*, **242**, 2502 (1956) (Гл. 8, § 5.)
Потенциальная энергия и упругие свойства кристаллической среды.
3185. Laval J., *Journ. Phys. Rad.*, **18**, 247, 289, 369 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Упругие свойства кристаллической среды. I. Потенциальная энергия и упругие атомные постоянные. II. Динамика упругих волн. III. Линейные деформации (статическая упругость).
3186. Laval J., *Bull. Soc. Franc. Minéral. Crist.*, **80**, 18 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Потенциальная энергия и упругие свойства кристаллической среды.
3187. Laval J., *Journ. Phys. Rad.*, **19**, 509 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Свойства упругих сил в приложении к атомам кристалла (статика кристаллической среды).
3188. Laval J., *Rev. Mod. Phys.*, **30**, 222 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Рентгеновское рассеяние, обусловленное тепловыми колебаниями атомов в кристалле.
3189. Laval J., *Journ. Phys. Rad.*, **20**, 1, 449 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое движение атомов в кристаллической среде.
3190. Laval J., *Journ. Phys. Rad.*, **20**, 577 (1959).
Термические напряжения в кристаллической среде.
3191. Lawless W. N., Devries R. C., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 1119 (1964). (Гл. 4, § 4.)
Поляризуемость кислорода и теория точечных диполей в применении к минералам карбонатов.
3192. Lax В., Mavroides J. G., *Phys. Rev.*, **100**, 1650 (1955), (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Статистика и гальваномагнитные эффекты в германии и кремнии с гофрированными изознергетическими поверхностями.
3193. Lax В., Button K. J., Zeiger H. J., Roth L. M., *Phys. Rev.*, **102**, 715 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Анализ циклотронного поглощения в висмуте.
3194. Lax В., Zeiger H. J., *Phys. Rev.*, **105**, 1466 (1957). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Возможная интерпретация циклотронного резонансного поглощения в графите.

3195. Lax В., Rev. Mod. Phys., 30, 122 (1958)
Экспериментальные исследования электронной зонной структуры твердых тел.
3196. Lax В., Roth L. M., Zwerdling S., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 311 (1959).
Магнетопоглощения в полупроводниках в квантовой области.
3197. Lax В., Wright G. B., Phys. Rev. Lett., 4, 16 (1960).
Магнетоплазменное отражение в твердых телах.
3198. Lax В., Phys. Rev. Lett., 4, 511 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Прямые (III) экситоны и магнетоотражение германия.
3199. Lax В., Mavroides J. G., Zeiger H. J., Keyes R. J., Phys. Rev. Lett., 5, 241 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Инфракрасное магнетоотражение в висмуте. I. Сильные поля.
3200. Lax В., Mavroides J. G., Solid State Phys., 11, 261 (1960). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс.
3201. Lax В., Mavroides J. G., Zeiger H. J., Keyes R. J., Phys. Rev., 122, 31 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в антимониде индия в сильных магнитных полях.
3202. Lax В., Nishina Y., Phys. Rev. Lett., 6, 464 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Теория внутризонного фарадеевского вращения в полупроводниках.
3203. Lax В., IRE Trans. Microwave Theory Techn. MTT-9, 83 (1961).
Магнетоплазменные эффекты в твердых телах.
3204. Lax В., Nishina Y., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2128 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Внутризонное фарадеевское вращение в соединениях $A^{III}B^{IV}$.
3205. Lax В., Science, 134, 1333 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс.
3206. Lax В., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 321. (Гл. 3, § 8.)
Магнетоспектроскопия полупроводников.
3207. Lax В., Mavroides J. G., Edwards D. F., Phys. Rev. Lett., 8, 166 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Нелинейные внутризонные и плазменные эффекты в твердых телах.
3208. Lax В., Semicond. Conf., Exeter., 1962, London, 1962, p. 265.
Измерения эффективных масс в полупроводниках.
3209. Lax В., Mavroides J. G., Kolodziejczak J., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 353. (Гл. 3, § 8.)
Теория дисперсии, внутризонные и плазменные эффекты.
3210. Lax В. (см. [1411—1413, 1786—1790, 2457, 2861, 3008, 3540, 3541, 3737, 4160, 4161, 4274, 4872, 4925, 4969—4976]).
3211. Lax М., Rev. Mod. Phys., 23, 287 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Множественное рассеяние волн.
3212. Lax М., Phys. Rev., 85, 621 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Множественное рассеяние волн. II. Эффективное поле в плотных системах.
3213. Lax М., Journ. Chem. Phys., 20, 1752 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Принцип Франка—Кондона и его применение к кристаллам.
(См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 407.)
3214. Lax М., Phys. Rev. 94, 1391 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Локализованные возмущения.
3215. Lax М., Lebowitz J. L., Phys. Rev., 96, 594 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Анализ особенностей колебательных спектров по методу моментов.

3216. Lax M., Burstein E., Phys. Rev., 97, 39 (1955). (Гл. 5, § 5)
Инфракрасное поглощение решетки в ионных и гомеоплярных кристаллах.
3217. Lax M., Burstein E., Phys. Rev., 100, 592 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Уширение примесных уровней в кремнии.
3218. Lax M., Sachs R., Phys. Rev., 107, 650 (1957).
Частотная зависимость сопротивления тонких полупроводниковых пленок на переменном токе.
3219. Lax M., Phys. Rev., 109, 1921 (1958).
Обобщенная теория подвижности.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961, стр. 225.)
3220. Lax M., Phys. Rev. Lett., 1, 131 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства кристаллов типа алмаза.
3221. Lax M., Phys. Rev. Lett., 1, 133 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Квадрупольные взаимодействия и колебательные спектры кристаллов типа алмаза.
3222. Lax M., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 66 (1959).
Гигантские ловушки.
3223. Lax M., Phys. Rev., 119, 1502 (1960).
Каскадный захват электронов в твердых телах.
3224. Lax M., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 484.
Современное состояние физики поверхности полупроводников.
3225. Lax M., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 487 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Квантовая релаксация, форма линии решеточного поглощения и неупругое рассеяние нейтронов.
3226. Lax M. (см. [1458, 2398, 2519]).
3227. Lauzer A. J., Phys. Rev., 129, 897 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Свойства одночастичной функции Грина в неоднородных многофермионных системах.
3228. Lauzer A. J., Phys. Rev., 129, 908 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Одночастичные возбуждения в плотном электронном газе, содержащем положительные точечные заряды.
3229. Лазарев А. Н., Зайцев А. С., ФТТ, 2, 3026 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Валентные колебания гидроксила в сегнетоэлектрических кристаллах KH_2PO_4 и KD_2P_4 .
3230. Лазукин В. Н., УФН, 59, 553 (1956). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс.
3231. LeBlanc O. H., Jr., Journ. Chem. Phys., 35, 1275 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и перенос дырок и электронов в антрацене.
3232. LeCoggе Y., Journ. Phys. Rad., 17, 934 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Несимметричность тензора напряжений и ее следствия.
3233. LeCoggе Y., Journ. Phys. Rad., 17, 1020 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Распространение плоской акустической волны в бесконечном пьезоэлектрическом кристалле.
3234. LeCoggе Y., Rev. Mod. Phys., 30, 229 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Электрическая поляризация упругих волн в кристаллах и оптическая дисперсия.
3235. LeCouteur K. J., Proc. Phys. Soc., 84, 837 (1964).
Матрица плотности Дирака.
3236. Leder L. B., Mendlowitz H., Marton L., Phys. Rev., 101, 1460 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Сравнение характеристических энергетических потерь электронов с тонкой структурой рентгеновских спектров поглощения.

3237. Leder L. B., Phys. Rev., **103**, 1721 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Электронные характеристические энергетические потери в металлах и соединениях.
3238. Leder L. B. (см. [3494]).
3239. Lee P. M., Pincherle L., Proc. Phys. Soc., **81**, 461 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронная зонная структура Bi_2Te_3 .
3240. Lee P. M. (см. [3923]).
3241. Lee T. D., Yang C. N., Phys. Rev., **105**, 1119 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Задача многих тел в квантовой механике и квантовой статистической механике.
3242. Lee Y. C., Tzoar N., Phys. Rev., **135**, A1326 (1964).
Зависящее от частоты время релаксации электронно-фононных систем в однородном магнитном поле.
3243. Leech J. W., Phil.-Mag., **46**, 1328 (1955). (Приложение 5, § 7.)
Влияние запаздывания на силы Лондона—Ван дер Ваальса.
3244. Leech J. W., Canad. Journ. Phys., **37**, 1044 (1959).
Применение термодинамики необратимых процессов и кинетической теории к выводу термоэлектрических соотношений.
3245. Leech J. W., Canad. Journ. Phys., **37**, 1067 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Ангармонические силы и эйнштейновская модель кристалла.
3246. Lefkowitz I., Proc. Phys. Soc., **80**, 868 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Замечания о нейтронном спектре сегнетоэлектрического и параэлектрического BaTiO_3 .
3247. Lefkowitz I. (см. [3863]).
3248. Lehman G. W., James H. M., Phys. Rev., **100**, 1698 (1955).
Взаимодействие примесей и подвижных носителей в полупроводниках.
3249. Lehman G. W., Wolfram T., De Wames R. E., Phys. Rev., **128**, 1593 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Аксиально-симметричная модель в динамике решетки металлов и ее применение для Cu, Al и ZrH_2 .
3250. Lehman G. W. (см. [1769, 1770, 4858]).
3251. Lehmann C., Leibfried G., Journ. Phys. Chem. Solids, **6**, 195 (1958).
Решеточная теория винтовых дислокаций в щелочных металлах.
3252. Leibfried G., Schlömann E., Nachr. Akad. Wiss. Goettingen Mat.-Phys. Kl. IIa, **71** (1954).
Теплопроводность в электрически изолирующих кристаллах.
3253. Leibfried G., в книге «Handbuch der Physik», Bd. 7, Berlin, 1955, S. 1 (Гл. 8, § 5.)
Решеточная теория механических и тепловых свойств кристаллов.
3254. Leibfried G., Hahn H., Zs. Phys., **150**, 497 (1958). (Гл. 8, § 5.)
О температурной зависимости упругих постоянных щелочногалогидных кристаллов.
3255. Leibfried G., Ludwig W., Zs. Phys., **160**, 80 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Условия равновесия в теории решетки.
3256. Leibfried G., Ludwig W., Solid State Phys., **12**, 276 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Теория ангармонических эффектов в кристаллах.
3257. Leibfried G. (см. [3251]).
3258. Leigh R. S., Phil. Mag., **42**, 876 (1951). (Гл. 3, § 11.)
Теория α -, α' -фаз в системе Al—Zn.

3259. Leighton R. B., Rev. Mod. Phys., 20, 165 (1948). (Гл. 3, § 5.)
Колебательный спектр и теплоемкость гранецентрированного кубического кристалла.
3260. Lemaire G., Journ. Phys. Chem. Solids, 13, 221 (1960).
Влияние граничных условий на распределение плотности электронов в периодической решетке.
3261. Lemaire G., Journ. Phys. Chem. Solids, 20, 50 (1961).
Об электронной структуре металлических примесей в приближении сильной связи.
3262. Lemaire G. (см. [2131]).
3263. Lenham A. R., Traherne D. M., Proc. Phys. Soc., 83, 1059 (1964). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Оптические постоянные монокристаллов кадмия и цинка.
3264. Legner L. S., Phys. Rev., 127, 1480 (1962). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Шубникова — де Гааза в Bi.
3265. Legner L. S., Phys. Rev., 130, 605 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Шубникова — де Гааза в Bi. II.
3266. Лесник А. Г., ДАН СССР, 122, 385 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Межатомное взаимодействие в сплавах системы железо — хром.
3267. Leverton W. F., Dekker A. J., Phys. Rev., 81, 156 (1951). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Постоянная Холла и сопротивление слоев висмута, осажденных в вакууме.
3268. Levin E. R., Offenbacher E. L., Phys. Rev., 118, 1142 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Теория диэлектрических проницаемостей LiF.
3269. Левин М. Л., ЖЭТФ, 29, 252 (1956)
Элементарный вывод формулы для электромагнитной энергии в диспергирующей среде.
3270. Levine H. B., Phys. Fluids, 3, 225 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Диаграммы разложения в квантовой статистике.
3271. Levinger B. W., Frankl D. R., Phys. Rev. Lett., 5, 12 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Сдвиг циклотронного резонанса в валентной зоне германия, обусловленный увеличением интенсивности.
3272. Levinger B. W., Frankl D. R., Journ. Phys. Chem. Solids, 20, 281 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Измерение параметров энергетической зоны в германии методом циклотронного резонанса.
3273. Levinger B. W. (см. [1635]).
3274. Levy H. A., Peterson S. W., Simonsen S. H., Phys. Rev., 93, 1120 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Исследование сегнетоэлектрической модификации дигидрофосфата калия методом дифракции нейтронов.
3275. Levy H. A. (см. [3874]).
3276. Li J. C. M., Tsuan Wu Ting, Journ. Chem. Phys., 27, 693 (1957).
Термодинамика упругих твердых тел в электростатическом поле. I. Общая формулировка.
3277. Liberman D., Waber J. T., Cromer D. T., Phys. Rev., 137, A27 (1965). (Гл. 11, § 3.)
Волновые функции атомов и ионов в методе самосогласованного поля Дирака — Слэтера.
3278. Liboff R. L., Phys. Rev., 134, A407 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Колебания в холодной электроотрицательной дипольной решетке.
3279. Lidgard A. B., Phys. Rev., 112, 54 (1958).
Пары вакансий в ионных кристаллах.

3280. Lidiard A. B. (см. [1327, 1328, 1986, 2597, 2598, 4471]).
3281. Lieberman D. S., Zirinsky S., *Acta Cryst.*, **9**, 431 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Упрощенный расчет упругих постоянных произвольно ориентированных монокристаллов.
3282. Liebermann I., *Journ. Acoust. Soc. Amer.*, **28**, 1253 (1956).
О зависимости поглощения звука в жидкостях от давления.
3283. Lien W. H., Phillips N. E., *Phys. Rev.*, **133**, A1370 (1964). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкости калия, рубидия и цезия при низких температурах.
3284. Лифшиц И. М., Пекар С. И., *УФН*, **58**, 531 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Связанные состояния Тамма для электронов на поверхности кристалла и поверхностные осцилляции атомов решетки.
3285. Лифшиц И. М., Косевич А. М., *ЖЭТФ*, **29**, 730 (1955).
К теории магнитной восприимчивости металлов при низких температурах.
3286. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И., *ЖЭТФ*, **30**, 220 (1956). (Гл. 2, § 4.)
К теории гальваномагнитных явлений в металлах.
3287. Лифшиц И. М., *ЖЭТФ*, **30**, 814 (1956). (Гл. 3, § 10.)
Квантовая теория электропроводности металлов в магнитном поле.
3288. Лифшиц И. М., Степанова Г. И., *ЖЭТФ*, **30**, 938 (1956). (Гл. 8, § 5.)
О спектре колебаний неупорядоченных кристаллических решеток.
3289. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И., *ЖЭТФ*, **31**, 63 (1956). (Гл. 2, § 4.)
К теории гальваномагнитных явлений в металлах.
3290. Лифшиц И. М., Степанова Г. И., *ЖЭТФ*, **31**, 156 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Влияние упорядочения на энергетический спектр фононов.
3291. Лифшиц И. М., *Nuovo Cimento, Suppl.*, **3**, 711 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Некоторые проблемы динамической теории неидеальных кристаллических решеток.
3292. Лифшиц И. М., *ЖЭТФ*, **32**, 1509 (1957). (Гл. 3, § 10.)
Квантовая теория электропроводности металлов в магнитном поле.
3293. Лифшиц И. М., Косевич А. М., *ЖЭТФ*, **33**, 88 (1957). (Гл. 2, § 4.)
К теории эффекта Шубникова — де Гааза.
3294. Лифшиц И. М., Косевич А. М., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **4**, 1 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Теория эффекта Шубникова — де Гааза.
3295. Лифшиц И. М., *Journ. Chem. Solids*, **4**, 11 (1958). (Гл. 3, § 10.)
Квантовая теория электропроводности металлов в магнитном поле.
3296. Лифшиц И. М., Песчанский В. Г., *ЖЭТФ*, **35**, 1251 (1958). (Гл. 3, § 10.)
Гальваномагнитные характеристики металлов с открытыми поверхностями Ферми.
3297. Лифшиц И. М., Каганов М. И., *ЖЭТФ*, **37**, 555 (1959).
Об электронном резонансе в скрещенных электрическом и магнитном полях.
3298. Лифшиц И. М., Песчанский В. Г., *ЖЭТФ*, **38**, 188 (1960). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные характеристики металлов с открытыми поверхностями Ферми. II.

3299. Лифшиц И. М., ЖЭТФ, **38**, 1569 (1960).
Об аномалии электронных характеристик металла в области больших давлений.
3300. Лифшиц И. М., ЖЭТФ, **40**, 1235 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Квантовый циклотронный резонанс в металлах.
3301. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Слуцкий А. А., ЖЭТФ, **43**, 1464 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Теория квантового циклотронного резонанса в металлах.
3302. Лифшиц И. М., Каганов М. И., УФН, **78**, 411 (1962).
Некоторые вопросы электронной теории металлов. II. Статистическая механика и термодинамика электронов в металлах.
3303. Лифшиц И. М. (см. [952, 1044, 1900, 2750, 3046]).
3304. Лихтер А. И., Кечин В. В., ФТТ, **5**, 3066 (1963). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Исследование зависимости гальваномагнитных эффектов в графите от температуры и давления.
3305. Лихтер А. И. (см. [1022]).
3306. Linde J. O., Physica, **24**, S109 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Свойства электрического сопротивления сплавов благородных металлов.
3307. Lindhard J., Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd., **28**, 8 (1954). (Гл. 11, § 7.)
О свойствах газа заряженных частиц.
3308. Lindquist R. E., Ewald A. W., Phys. Rev., **135**, A191 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Оптические константы монокристалла серого олова в инфракрасной области.
3309. Ling R. C., Journ. Chem. Phys., **25**, 614 (1956).
Рассеяние рентгеновских лучей жидкими металлическими сплавами (кинетический метод).
3310. Lipkin H. J., Phys. Rev. Lett., **2**, 159 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Коллективное описание электронных взаимодействий без дополнительных условий.
3311. Lippmann H. J., Kuhrt F., Naturwiss., **45**, 156 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Влияние геометрии на эффект Холла и магнетосопротивление прямоугольных полупроводниковых образцов.
3312. Лисица М. П., Холодарь Г. А., ФТТ, **2**, 2117 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение и энергетическая структура записи меди.
3313. Лисица М. П. (см. [3045]).
3314. Litzman O., Czech. Journ. Phys., **7**, 410 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Метод расчета колебаний возмущенной цепочки атомов.
3315. Litzman O., Czech. Journ. Phys., **7**, 690 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Локальные колебания возмущенной двухатомной линейной цепочки.
3316. Litzman O., Czech. Journ. Phys., **8**, 633 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Локальные колебания в простой кубической решетке; одиночный примесный атом, взаимодействие с шестью ближайшими соседями.
3317. Litzman O., Czech. Journ. Phys., **9**, 692 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Моменты спектра частот и термодинамические функции кристаллов с дефектами.
3318. Liu L., Phys. Rev. Lett., **6**, 683 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Спин-орбитальное расщепление валентной зоны и g -тензор зоны проводимости в кремнии.
3319. Liu S. S., Toxep A. M., Phys. Rev., **138**, A487 (1965). (Гл. 3, § 9.)
Магнетоакустический эффект в благородных металлах.

3320. Loh E., Phillips J. C., Journ. Phys. Chem. Solids, **24**, 495 (1963).
Влияние зонной структуры на фотопроводимость полупроводников.
3321. Lombardi E., Jansen L., Phys. Rev., **136**, A1011 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Устойчивость кристаллов инертных газов и щелочногалогидных кристаллов при учете трехчастичных взаимодействий. II. Щелочногалогидные кристаллы.
3322. Lombardi E. (см. [2701]).
3323. Lomer W. M., Proc. Phys. Soc., **80**, 489 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура металлов группы хрома.
3324. Lomer W. M., Proc. Phys. Soc., **84**, 327 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Поверхность Ферми в молибдене.
3325. Lomer W. M. (см. [2086]).
3326. Long D., Phys. Rev., **101**, 1256 (1956).
Влияние давления на электрические свойства полупроводников.
3327. Long D., Phys. Rev., **107**, 672 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в кремнии p -типа.
3328. Long D., Myers J., Phys. Rev., **109**, 1098 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление в кремнии p -типа в слабых полях.
3329. Longini R. L., Greene R. F., Phys. Rev., **102**, 992 (1956).
Ионизационное взаимодействие между примесями в полупроводниках и изоляторах.
3330. Longo T. A., Ray R. K., Lark-Horowitz K., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 259 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Низкотемпературная примесная проводимость в кремнии.
3331. Lonsdale K., Grenville-Wells H. J., Nature, **177**, 986 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Анизотропные температурные факторы в кубических кристаллах.
3332. Lonsdale K., Rev. Mod. Phys., **30**, 168 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Тепловые колебания атомов и молекул в кристаллах.
3333. Lonsdale K. (см. [1065, 1221, 2254]).
3334. Lorenz M. R., Segall B., Woodbury H. H., Phys. Rev., **134**, A751 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Некоторые свойства двойного акцепторного центра в CdTe.
3335. Loucks T. L., Phys. Rev., **134**, A1618 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Новые результаты относительно поверхности Ферми в бериллии.
3336. Loucks T. L., Cutler P. H., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 105 (1964).
Влияние корреляции на поверхностный потенциал металла в приближении свободных электронов.
3337. Loudon R., Proc. Phys. Soc., **84**, 379 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Правила отбора для решеточных полос, активированных дефектами, и вибранные переходы в гранцентрированной кубической решетке и решетках со структурой типа алмаза и цинковой обманки.
3338. Loudon R., Phys. Rev., **137**, A1784 (1965).
Общие правила отбора для двухфононных процессов согласно теории пространственных групп.
3339. Loudon R. (см. [1946—1948]).
3340. Love W. F., Journ. Phys. Chem. Solids, **9**, 281 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в меди и в Cu_3Au при низких температурах.
3341. Love W. F. (см. [2503, 4630, 4811]).
3342. Low G. G. E., Proc. Phys. Soc., **B69**, 1331 (1956).
Метод оценки параметров поверхностных состояний из измерений проводимости полупроводников.

3343. Low G. G. E., Proc. Phys. Soc., **71**, 965 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Акустимагнетоэлектрические эффекты в металлических и полупроводниковых нитевидных образцах.
3344. Low G. G. E., Proc. Phys. Soc., **79**, 479 (1962). (Гл. 8, § 1 и 5.)
Определение закона дисперсии фононов в железе.
3345. Löwdin P. O., Arkiv Mat. Astr. Fys., **A35** (9) (1947); (30) (1948). (Гл. 9, § 6; гл. 10, § 4.)
Квантовомеханический расчет энергий связи, межатомных расстояний и упругих постоянных некоторых ионных кристаллов. I, II.
3346. Löwdin P. O., Journ. Chem. Phys., **19**, 1570, 1579 (1951). (Гл. 10, § 4.)
К вопросу о квантовомеханическом расчете энергии связи молекул и кристаллов. I. Общая формула для основного состояния. II. Теория щелочных металлов и численный расчет для натрия.
3347. Löwdin P. O., Rept. Nikko Symp. Mol. Phys., Tokyo, 1954, p. 13. (Гл. 10, § 4.)
Метод альтернантных молекулярных орбит.
3348. Löwdin P. O., Phys. Rev., **97**, 1474, 1490, 1509 (1955). (Гл. 10, § 4; гл. 11, § 4.)
Квантовая теория систем многих частиц. I. Физическая интерпретация с помощью матриц плотности, естественные спин-орбитальные функции и проблема сходимости в методе конфигурационного взаимодействия. II. Изучение обычного приближения Хартри—Фока. III. Обобщение схемы Хартри—Фока на случай вырожденных систем и на предмет учета корреляционных эффектов.
3349. Löwdin P. O., Svensk Kem. Tidskr., **67**, 369 (1955). (Гл. 11, § 4.)
Естественные спин-орбитальные функции и конфигурационное разложение, обладающее наиболее быстрой сходимостью.
3350. Löwdin P. O., Svensk Kem. Tidskr., **67**, 370 (1955). (Гл. 11, § 4.)
Обобщение схемы Хартри—Фока на случай учета корреляционных эффектов.
3351. Löwdin P. O., Proc. 10th Solvay Conf., Brussels, 1955, p. 71. (Гл. 10, § 4.)
Обобщение метода Хартри—Фока на случай учета корреляционных эффектов.
3352. Löwdin P. O., Adv. Phys., **5**, 1 (1956). (Гл. 9, § 6; гл. 10, § 6.)
Квантовая теория сил сцепления твердых тел.
3353. Löwdin P. O., Shull H., Phys. Rev., **101**, 1730 (1956). (Гл. 11, § 4.)
Естественные орбиты в квантовой теории двухэлектронной системы.
3354. Löwdin P. O., в сборнике «Calcul des fonctions d'onde moleculaires», Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, 1958, p. 23.
Природа функций мезомерии.
3355. Löwdin P. O., Journ. Appl. Phys., **33** (Suppl. 1), 251 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Зонная теория, валентная связь и расчеты в приближении сильной связи.
3356. Löwdin P. O., Rev. Mod. Phys., **34**, 80 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Обмен, корреляция и спиновые эффекты в теории молекул и твердых тел.
3357. Löwdin P. (см. [3842, 4311]).
3358. Lucas R., Journ. Phys. Rad., **17**, 395 (1956).
Давление излучения в акустике.
3359. Lüscke K., Journ. Appl. Phys., **27**, 1433 (1956). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука, обусловленное термоупругим тепловым потоком.

3360. Ludwig W., Journ. Phys. Chem. Solids, 4, 283 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Влияние ангармоничности на свойства кристаллов.
3361. Ludwig W. (см. [3255]).
3362. Луговой В. Н., ЖЭТФ, 41, 1562 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в переменном магнитном поле.
3363. Lummis F. L., Petritz R. L., Phys. Rev., 105, 501 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Шумы, постоянные времени и холловские исследования фотопроводящих пленок сульфида свинца.
3364. Lundqvist S. O., Fröman P. O., Arkiv Fys., 2, 431 (1950). (Гл. 9, § 5; гл. 10, § 4.)
Некоторые замечания относительно расчета энергии связи ионных кристаллов.
3365. Lundqvist S. O., Arkiv Fys., 8, 177 (1954). (Гл. 9, § 6; гл. 10, § 4.)
Квантовомеханическое исследование энергии связи кристалла LiH.
3366. Lundqvist S. O., Arkiv Fys., 9, 435 (1954). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5; гл. 10, § 4.)
Предельные частоты колебаний кубической ионной решетки.
3367. Lundqvist S. O., Arkiv. Fis., 12, 263 (1957). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Колебания решетки кубических ионных кристаллов.
3368. Lundqvist S. O., Lundström V., Tenerz E., Waller I., Arkiv Fys., 15, 193 (1959). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Колебания решетки и теплоемкость кристаллов KCl и NaCl при низких температурах.
3369. Lundqvist S. O. (см. [4781]).
3370. Lutes O. S., Clayton D. A., Phys. Rev., 138, A1448 (1965). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Продольное магнетосопротивление чистых алюминиевых проволок.
3371. Lüthi B., Helv. Phys. Acta, 29, 217 (1956). (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление металлов в сильных магнитных полях.
3372. Lüthi B., Phys. Rev. Lett., 2, 503 (1959). (Гл. 3, § 10.)
Продольное магнетосопротивление металлов в сильных полях.
3373. Lüthi B., Helv. Phys. Acta, 33, 161 (1960). (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивления металлов в сильных полях.
3374. Luttinger J. M., Tisza L., Phys. Rev., 70, 954 (1946); 72, 257 (1947).
Теория дипольного взаимодействия в кристаллах.
3375. Luttinger J. M., Phys. Rev., 84, 814 (1951).
Влияние магнитного поля на электроны в периодическом поле.
3376. Luttinger J. M., Kohn W., Phys. Rev., 97, 869 (1955).
Движение электронов и дырок в возмущенных периодических полях. (См. перевод в сборнике «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, 1957, стр. 515.)
3377. Luttinger J. M., Goodman R. R., Phys. Rev., 100, 673 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Классическая теория циклотронного резонанса для дырок в Ge.
3378. Luttinger J. M., Phys. Rev., 102, 1030 (1956). (Гл. 3, § 8.)
Квантовая теория циклотронного резонанса в полупроводниках; обшая теория.
3379. Luttinger J. M., Kohn W., Phys. Rev., 109, 1892 (1958).
Квантовая теория электрических явлений переноса. II. (См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», ИЛ, 1961, стр. 170.)
3380. Luttinger J. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 123 (1959).
Теория явлений переноса.

3381. Luttinger J. M., Phys. Rev., **119**, 1153 (1960) (Гл. 11, § 7.)
Поверхность Ферми и некоторые простые равновесные свойства системы взаимодействующих фермионов.
3382. Luttinger J. M., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 2. (Гл. 11, § 7.)
Теория поверхности Ферми.
3383. Luttinger J. M., Phys. Rev., **121**, 1251 (1961). (Гл. 3, § 9; гл. 11, § 7.)
Теория эффекта де Гааза—ван Альфена в системе взаимодействующих фермионов.
3384. Luttinger J. M. (см. [2522, 2994, 3001]).
3385. Львов С. Н., Немченко В. Ф., Самсонов Г. В., ДАН СССР, **135**, 577 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Некоторые закономерности электрических свойств боридов, карбидов и нитридов переходных металлов IV—VI групп периодической системы.
3386. Ляст И. Ц., ФТТ, **2**, 1256 (1960).
Поляризация ионных кристаллов, содержащих релаксирующие дефекты.
3387. Ляст И. Ц., ФТТ, **2**, 1269 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Взаимодействие ионов в решетке перовскита.
3388. Lyden H. A., Phys. Rev., **134**, A1106 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Измерение эффективной массы проводимости в полупроводниках с помощью инфракрасного отражения.
3389. Любимов В. Н., Веневцев Ю. Н., Жданов Г. С., ФТТ, **4**, 2123 (1962).
О сегнето- и антисегнетоэлектричестве в полярных кристаллах.
3390. Любимов В. Н., Веневцев Ю. Н., Соловьев С. П., Жданов Г. С., Бакушинский А. Б., ФТТ, **4**, 3543 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Дипольная структура и внутренние электрические поля в PbZrO_3 .
3391. McAfee K. B., Ryder E. J., Shockley W., Sparks M., Phys. Rev., **83**, 650 (1951). (Гл. 3, § 11.)
Наблюдения зинеровского тока в германиевых $p-n$ -переходах.
3392. McCluge J. W., Phys. Rev., **104**, 666 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Диамагнетизм графита.
3393. McCluge J. W., Phys. Rev., **112**, 715 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Анализ гальваномагнитных данных для графита с учетом нескольких типов носителей.
3394. McCluge J. W., Phys. Rev., **119**, 606 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Теория диамагнетизма графита.
3395. McCluge J. W., Journ. Chim. Phys., **57**, 859 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура и магнитные свойства монокристаллического графита.
3396. McCluge J. W., Journ. Phys. Chem. Solids, **24**, 871 (1963).
Электронная структура моносульфидов редкоземельных элементов.
3397. McCluge J. M. (см. [4417, 4418]).
3398. McCombie C. W., Slater J., Proc. Phys. Soc., **84**, 499 (1964) (Гл. 8, § 5.)
Рассеяние колебаний решетки точечным дефектом. I.
3399. MacDonald D. K. C., Proc. Phys. Soc., **A63**, 290 (1950). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление щелочных металлов.
3400. MacDonald D. K. C., Sarginson K., Rept. Progr. Phys., **15**, 249 (1952). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные эффекты в проводниках.
3401. MacDonald D. K. C., Proc. 10th Solvay Congr., Brussels, 1954, p. 89.
Сопротивление металлов при низких температурах.

3402. Mac Donald D. K. C., *Phil. Mag.*, **2**, 97 (1957). (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление металлов.
3403. Mac Donald D. K. C., Pearson W. B., Templeton I. M., *Phil. Mag.*, **3**, 657 (1958).
Измерения термо-э. д. с. ниже 1° К.
3404. Mac Donald D. K. C., Pearson W. B., Templeton I. M., *Proc. Roy. Soc.*, **A248**, 107 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Термо-э. д. с. при низких температурах. VII. Термо-э. д. с. щелочных металлов между 2 и 20° К.
3405. Mac Donald D. K. C. (см. [1877, 1878, 2055, 2293, 2393]).
3406. Macfarlane G. G., *Proc. Phys. Soc.*, **63**, 807 (1950).
Теория контактного шума в полупроводниках.
3407. Macfarlane G. G., Roberts V., *Phys. Rev.*, **97**, 1714 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение в германии вблизи края решеточного поглощения.
3408. Macfarlane G. G., Roberts V., *Phys. Rev.*, **98**, 1865 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение в кремнии вблизи края решеточного поглощения.
3409. Macfarlane G. G., McLean T. P., Quarrington J. E., Roberts V., *Phys. Rev.*, **108**, 1377 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Тонкая структура края спектра поглощения Ge.
3410. Macfarlane G. G., McLean T. P., Quarrington J. E., Roberts V., *Proc. Phys. Soc.*, **71**, 863 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Прямые оптические переходы и новые экситонные эффекты в германии.
3411. Macfarlane G. G., McLean T. P., Quarrington J. E., Roberts V., *Phys. Rev.*, **111**, 1245 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Тонкая структура края спектра поглощения в кремнии.
3412. Macfarlane G. G., McLean T. P., Quarrington J. E., Roberts V., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 388 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Экситонные и фононные эффекты в спектрах поглощения германия и кремния.
3413. Macfarlane G. G. (см. [1945]).
3414. McIrvine E. C., Overhauser A. W., *Phys. Rev.*, **115**, 1531 (1959).
Новое квантовомеханическое представление.
3415. McIrvine E. C., *Phys. Rev.*, **115**, 1537 (1959).
Квантовомеханический метод описания тепловых явлений переноса в металлах.
3416. McIrvine E. C., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **15**, 928 (1960).
Экранированные потенциалы примесей в металлах.
3417. Mackenzie J. K., Sondheimer E. H., *Phys. Rev.*, **77**, 264 (1950).
Теория изменения проводимости металлов, вызванного холодной обработкой.
3418. Mackenzie J. K., Mott N. F., *Proc. Phys. Soc.*, **A63**, 411 (1950).
Замечание к теории металлов.
3419. Maskinpon L., Taylor M. T., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 251. (Гл. 3, § 9.)
О возможной связи между формой поверхности Ферми и диаграммами для затухания ультразвука при вращении магнитного поля.
3420. Maskinpon L., Taylor M. T., Daniel M. R., *Phil. Mag.*, **7**, 523 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетоакустические эффекты в параллельном магнитном поле в свинце и кадмии.

3421. Maskinpon L. (см. [1691]).
3422. Maskintosh A. R., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 233. (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетоакустические эффекты в свинце и олове.
3423. Maskintosh A. R., Sprafel L. E., Young R. C., Phys. Rev. Lett., 10, 434 (1963). ((Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетосопротивление и топология поверхности Ферми таллия.
3424. Maskintosh A. R., Proc. Roy. Soc., A271, 88 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Затухание ультразвука в свинце.
3425. Maskintosh A. R., Journ. Chem. Phys., 38, 1991 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Модель электронной структуры металлических вольфрамовых бронз.
3426. Maskintosh I. M., Allen J. W., Proc. Phys. Soc., B68, 985 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Время жизни избыточных носителей в InSb.
3427. Maskintosh I. M., Proc. Phys. Soc., B69, 403 (1956). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Низкотемпературные аномалии магнетосопротивления в антимониде индия.
3428. McLachlan A. D., Proc. Roy. Soc., A271, 389 (1963). (Приложение 5 § 7.)
Запаздывающие дисперсионные силы взаимодействия между молекулами.
3429. McLachlan A. D., Proc. Roy. Soc., A274, 80 (1963). (Приложение 5, § 7.)
Запаздывающие дисперсионные силы взаимодействия в диэлектриках при конечной температуре.
3430. McWeeny R., Journ. Chem. Phys., 17, 341 (1949).
Диамагнитная анизотропия *p*-полифенилов.
3431. McWeeny R., Proc. Phys. Soc., A64, 261 (1951).
Диамагнитная анизотропия больших ароматических систем. I, II.
3432. McWeeny R., Proc. Phys. Soc., A64, 921 (1951).
Диамагнитная анизотропия больших ароматических систем. III. Структуры с гексагональной симметрией.
3433. McWeeny R., Acta Cryst., 4, 513 (1951); 5, 463 (1952).
Рассеяние рентгеновских лучей на совокупностях связанных атомов. I. Аналитические приближения в монокристаллическом рассеянии. II. Влияние связей; приложение к случаю H₂.
3434. McWeeny R., Proc. Phys. Soc., A65, 839 (1952); A66, 714 (1953).
Диамагнитная анизотропия больших ароматических систем. IV, V. Полиацены, интерпретация результатов.
3435. McWeeny R., Acta Cryst., 6, 631 (1953); 7, 180 (1954).
Рассеяние рентгеновских лучей на совокупностях связанных атомов. III. Фактор, учитывающий влияние связей на рассеяние; простые методы аппроксимации в общем случае. IV. Применение метода к атому углерода.
3436. McWeeny R., Mol. Phys., 1, 311 (1958).
Кольцевые токи и протонный магнитный резонанс в ароматических молекулах.
3437. McWeeny R., Mizuno Y., Proc. Roy. Soc., A259, 554 (1961) (Гл. 11, § 7.)
Матрица плотности в квантовой механике многоэлектронных систем. II. Разделение пространственных и спиновых переменных; проблемы спинового взаимодействия.
3438. McWeeny R., Journ. Chem. Phys., 36, 2353 (1962).
Кольцевые токи в ароматических молекулах.

3439. McWeeny R., Sutcliffe B. T., Proc. Roy. Soc., A273, 103 (1963).
(Гл. 11, § 7.)
Матрица плотности в квантовой механике многоэлектронных систем. III. Обобщенные мультипликативные функции для бериллия и четырехэлектронных ионов.
3440. McWeeny R. (см. [3443]).
3441. Maske W., Zs. Naturforsch., 5a, 192 (1950). (Гл. 11, § 7.)
О взаимодействиях в ферми-газе.
3442. Maske W., Phys. Rev., 100, 992 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Квантовомеханическая трактовка ферми-газа.
3443. Maddox I. J., McWeeny R., Journ. Chem. Phys., 36, 2353 (1962).
Кольцевые токи в ароматических молекулах.
3444. Madelung O., Naturwiss., 42, 406 (1955). (Гл. 2, § 4.)
Гальваноманнитные эффекты в полупроводниках.
3445. Madelung O., Zs. Naturforsch., 11a, 478 (1956).
К теории теплопроводности изотропного полупроводника в магнитном поле.
3446. Madelung O., Zs. Elektrochem., 60, 7 (1956).
Полупроводниковая монофаза.
3447. Madelung O., в книге «Handbuch der Physik», Bd. 20, Berlin, 1957, S. 1.
Полупроводники.
3448. Madelung O., Zs. Naturforsch., 13a, 22 (1958).
К теории термоэлектрических эффектов в полупроводниках.
3449. Madelung O., Nuovo Cimento, Suppl., 7, 730 (1958).
Полупроводники с малой эффективной массой носителей.
3450. Madelung O., Zs. Naturforsch., 14a, 951 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в полупроводниках с $p-n$ -переходом.
3451. Mada K., Journ. Phys. Chem. Solids, 9, 335 (1959).
Одномерные конфигурационные кривые для люминесцентных центров.
3452. Magid L. M., Phys. Rev., 134, A158 (1964).
Поток механической энергии в кристаллических решетках.
3453. Magid L. M., Phys. Rev., 134, A163 (1964).
Исследование потока тепла в кристаллических решетках по методу затухающих волн.
3454. Maisch W. G., Drickamer H. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 5, 328 (1958).
Влияние давления на центры окраски в щелочногалогенидных кристаллах.
3455. Махов А. Ф., ФТТ, 1, 1749 (1959).
К вопросу об универсальном характере проникновения электронов в твердые тела.
3456. Махов А. Ф., ФТТ, 2, 2161, 2172, 2176 (1960).
О проникновении электронов в твердые тела.
3457. Махов А. Ф. (см. [4767]).
3458. Манса Р., Journ. Phys. Chem. Solids, 20, 268 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Соотношение между энергией связи и шириной запрещенной зоны в полупроводниках со структурой алмаза и цинковой обманки.
3459. Mandel M., Mazur P., Physica, 24, 116 (1958).
К молекулярной теории диэлектрической поляризации.
3460. Manphout-van der Vorst W., Dekeyser W., Physica, 23, 903 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Измерения оптического поглощения в щелочногалогенидных кристаллах, активированных серебром.

3461. Manohar C., *Phys. Rev.*, **138**, A731 (1965).
Одномерная ангармоническая решетка. Сдвиг энергии и время жизни экситона.
3462. Mansfield R., *Proc. Phys. Soc.*, **B69**, 76 (1956).
Примесное рассеяние в полупроводниках.
3463. Mansfield R., *Proc. Phys. Soc.*, **B69**, 862 (1956). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в полупроводниках.
3464. Mansfield R., *Proc. Phys. Soc.*, **B70**, 240 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в полупроводниках.
3465. Mansikka K., *Ann. Acad. Sci. Fennicae, ser. AVI*, **81**, 1 (1961).
О распределении плотности электронов в ионах кристаллов NaCl, KCl и RbCl.
3466. Many A., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 87 (1959).
Электрическая структура полупроводниковых поверхностей.
3467. Maradudin A. A., Mazur P., Montroll E. W., Weiss G. H., *Rev. Mod. Phys.*, **30**, 175 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Замечания о колебаниях двухатомных решеток.
3468. Maradudin A. A., Weiss G. H., *Journ. Chem. Phys.*, **29**, 631 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Колебания обобщенной двухатомной решетки.
3469. Maradudin A. A., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **9**, 1 (1959).
Винтовые дислокации и теория упругости дискретной среды.
3470. Maradudin A. A., Weiss G. H., *Nuovo Cimento*, **15**, 408 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Закон дисперсии и колебательный спектр.
3471. Maradudin A. A., Ambeegaokar V., *Phys. Rev.*, **135**, A1071 (1964).
Расчет функции рассеяния $S(k, \omega)$ для неупругого рассеяния нейтронов в ангармонических кристаллах.
3472. Maradudin A. A. (см. [1514, 1609, 1822, 1823, 2358, 4789, 4814]).
3473. March N. H., *Adv. Phys.*, **6**, 1 (1957). (Гл. 10, § 1.)
Приближение Томаса — Ферми в квантовой механике.
3474. March N. H., Murray A. M., *Proc. Phys. Soc.*, **79**, 1001 (1962). (Гл. 10, § 1; гл. 11, § 7.)
Возмущения в электронном газе при ненулевых температурах.
3475. March N. H., Murray A. M., *Phys. Rev.*, **126**, 1480 (1962). (Гл. 10, § 1.)
Увеличение электронной плотности вокруг положительных точечных зарядов в металлах и времена жизни позитронов.
3476. March N. H. (см. [962, 1098, 1272, 1646, 1694, 1834, 1835, 2521, 2720, 4911]).
3477. Marchand A., *Journ. Phys. Rad.*, **18**, 403 (1957). (Гл. 3, § 9.)
Определение поверхности Ферми из эффекта де Гааза — ван Альфена.
3478. Marcus A., *Phys. Rev.*, **135**, A527 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Расчет зонной структуры арсенида галлия.
3479. Marcus S. M., Langenberg D. N., *Journ. Appl. Phys.*, **34**, 1367 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивления монокристаллов никеля в сильных полях.
3480. Marcus S. M. (см. [3174]).
3481. Margenau H., Rosen P., *Journ. Chem. Phys.*, **21**, 394 (1953). (Приложение 5, § 7.)
О взаимодействии заполненных оболочек.
3482. Margenau H. (см. [2846]).
3483. Margham J. J., Seitz F., *Phys. Rev.*, **74**, 1014 (1948). (Гл. 3, § 11.)
Энергия связи автолокализованного электрона в NaCl.

3484. Markham J. J., Phys. Rev., 103, 588 (1956).
Электронно-ядерные волновые функции в теории многофононных процессов.
3485. Markham J. J., Rev. Mod. Phys., 31, 956 (1959).
Взаимодействие нормальных колебаний с электронными ловушками.
3486. Markham J. J. (см. [1525]).
3487. Marshall W., Phys. Rev., 118, 1519 (1960). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость разбавленных сплавов.
3488. Marsocci V. A., Phys. Rev., 137, A1842 (1965). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Влияние спин-орбитального взаимодействия на магнетосопротивление монокристалла никеля и железо-никелевых тонких пленок.
3489. Martinssen W., Naturwiss., 44, 551 (1957).
К вопросу об эффективной массе электронов в кристаллах.
3490. Martinssen W., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 294 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Край оптического поглощения в ионных кристаллах.
3491. Martienssen W. (см. [1629]).
3492. Martin D. A., Adv. Phys., 14, 39 (1965). (Гл. 8, § 5.)
Изучение колебаний кристаллической решетки с помощью далекой инфракрасной спектроскопии.
3493. Martin P. C.; Schwinger J., Phys. Rev., 115, 1342 (1959). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Теория систем многих частиц. I.
(См. перевод: П. Мартин, Ю. Швингер, Теория систем многих частиц. I, ИЛ, 1962.)
3494. Marton L., Leder L. B., Mendlowitz H., Adv. Electron., 7, 183 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Характеристические энергетические потери в твердых телах.
3495. Marton L., Rev. Mod. Phys., 28, 172 (1956). (Гл. 5, § 3; гл. 11, § 7.)
Эксперименты по рассеянию электронов малых энергий и энергетические потери.
3496. Marton L. (см. [3236]).
3497. Mascarenhas S., Nuovo Cimento, 5, 1118 (1957).
Термодинамическая теория теплопроводности диэлектриков в электрических полях.
3498. Mase S., Тапита S., Sci. Rept. Res. Inst. Tohoku Univ., A12, 35 (1960). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные тензоры монокристаллов висмута при низких температурах.
3499. Mase S., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 134. (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Анизотропия гальваномагнитных тензоров полуметаллов, в особенности висмута.
3500. Mase S. (см. [1020]).
3501. Машкевич В. С., Толпыго К. Б., ДАН СССР, 111, 575 (1956). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Взаимодействие колебаний неполярных кристаллов с электрическими полями.
3502. Машкевич В. С., Толпыго К. Б., ЖЭТФ, 32, 520 (1957). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Электрические, оптические и упругие свойства кристаллов типа алмаза. I.
3503. Машкевич В. С., ЖЭТФ, 32, 866 (1957). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Электрические, оптические и упругие свойства кристаллов типа алмаза. II. Колебания решетки с учетом дипольных моментов атомов.

3504. М а ш к е в и ч В. С., ДАН СССР, 121, 247 (1958). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Нормальные координаты кристаллической решетки при учете запаздывания взаимодействия.
3505. М а ш к е в и ч В. С., ФТТ, 2, 908 (1960). (Гл. 9, § 5; гл. 10, § 4.)
Приближения высокого порядка в методе Эвальда.
3506. М а ш к е в и ч В. С., ФТТ, 2, 2629 (1960). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Дипольное приближение в микротeorии кристаллов. I. Колебания решетки с учетом электронной дисперсии.
3507. М а ш к е в и ч В. С., ФТТ, 4, 2075 (1962). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Об условиях проявления пространственной дисперсии в кристаллах.
3508. M a s o n W. W., Proc. Phys. Soc., A69, 734 (1956).
Фермиевская, или обменная, дырка в атомах.
3509. M a s o n W. P., Matthias V. T., Phys. Rev., 74, 1622 (1948). (Гл. 8, § 5.)
Теоретическая модель для объяснения сегнетоэлектрического эффекта в титанате бария.
3510. M a s o n W. P., Matthias V. T., Phys. Rev., 88, 477 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Пьезоэлектрические, диэлектрические и упругие свойства $\text{ND}_4\text{D}_2\text{PO}_4$.
3511. M a s o n W. P., Phys. Rev., 88, 480 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Свойства тетрагонального антисегнетоэлектрического кристалла.
3512. M a s o n W. P., Bell Syst. Techn. Journ., 34, 903 (1955). (Гл. 3, § 9.)
Влияние дислокаций на затухание ультразвуковых волн в металлах.
3513. M a s o n W. P., Phys. Rev., 97, 557 (1955). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука, обусловленное взаимодействием электронов с решеткой в нормальных металлах.
3514. M a s o n W. P., Böttmel H. E., Journ. Acoust. Soc. Amer., 28, 930 (1956). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука в металлах при низких температурах в нормальном и сверхпроводящем состояниях.
3515. M a s o n W. P., Bateman T. V., Phys. Rev. Lett., 10, 151 (1963). (Гл. 3, § 9.)
Затухание и изменение скорости ультразвука в легированных германии *n*-типа и кремнии *p*-типа; применение для определения времени релаксации электронов и дырок.
3516. M a s o n W. P., Bateman T. V., Phys. Rev., 134, A1387 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Распространение ультразвуковых волн в легированных *n*-германии и *p*-кремнии.
3517. M a s s a l s k i T. V., в книге «Theory of Alloy Phases», American Society for Metals, 1956, p. 63.
Промежуточные фазы и электронная структура.
3518. M a s s a l s k i T. V., King H. W., Acta Met., 8, 677 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Постоянные решетки межатомных расстояний в решетках плотно упакованных α - и ζ -фаз на основе золота.
3519. M a s s a l s k i T. V., King H. W., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 290.
Изменения межатомных расстояний в сплавах и форма поверхности Ферми.
3520. M a s s a l s k i T. V., Journ. Phys. Rad., 23, 647 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Общие закономерности в постоянных решетки плотно упакованных гексагональных фаз на основе благородных металлов.
3521. M a s s a l s k i T. V. (см. [2888]).

3522. Masterson K. S., Jr., Sawada K., Phys. Rev., **133**, A1234 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Энергия многофермионной нормальной системы.
3523. Matossi F., Jour. Electrochem. Soc., **103**, 662 (1956).
Теория динамического гашения фотопроводимости и люминесценции.
3524. Matsubara T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **13**, 628 (1955).
Квантовая статистическая механика электрон-фононной системы.
3525. Matsubara T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **14**, 351 (1955).
Новый метод приближения в квантовой статистической механике.
3526. Matsuda N., Jour. Phys. Soc. Japan, **18**, 380 (1963).
Взаимодействие плазмона в твердом теле с излучением. II. Оптическое поглощение в тонких металлических пленках.
3527. Matsuda N. (см. [2773, 2776]).
3528. Matsuura K., Jour. Phys. Soc. Japan, **18**, 1319, 1649 (1963).
Взаимодействие плазменных колебаний с полем излучения. I, II.
3529. Matsuura K. (см. [2885]).
3530. Matthias B. T., Remeika J. P., Phys. Rev., **103**, 262 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектричество в сульфате аммония.
3531. Mattheiss L. F., Phys. Rev., **138**, A112 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Энергетические зоны в соединениях типа V_3X .
3532. Mattis D. C., Phys. Rev., **106**, 721 (1957).
Длина свободного пробега фонона в изотопической смеси.
3533. Mattis D. C., Dresselhaus G., Phys. Rev., **111**, 403 (1958). (Гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект в магнитном поле.
3534. Mattis D. C., Varden J., Phys. Rev., **111**, 412 (1958). (Гл. 5, § 1.)
Теория аномального скин-эффекта в нормальных и сверхпроводящих металлах.
3535. Mattis D. S., Stevenson M. J., Phys. Rev. Lett., **3**, 18 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонанса для частиц отрицательной массы.
3536. Matyas M., Skacha J., Czech. Jour. Phys., **12**, 566 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Измерения магнетосопротивления в GaSb p -типа.
3537. Matyas M. (см. [2124]).
3538. Матыгина З. А., Смирнов А. А., Укр. физич. журн., **2**, 14 (1957).
К теории электросопротивления упорядочивающихся сплавов переходных металлов с переходными.
3539. Матыгина З. А. (см. [1693, 1895]).
3540. Mavroides J. G., Lax V., Phys. Rev., **107**, 1530 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление дырок в германии и кремнии с гофрированными изоэнергетическими поверхностями.
3541. Mavroides J. G., Lax V., Button K. J., Shapira Y., Phys. Rev. Lett., **9**, 451 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Квантовые осцилляции скорости ультразвука в висмуте.
3542. Mavroides J. G. (см. [1411, 2473, 3192, 3199, 3200, 3201, 3207, 3209]).
3543. May R. M., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **23**, 400 (1960).
Диамagnetизм электронов в слабом периодическом поле.
3544. Mauburg S., Phys. Rev., **79**, 375 (1950). (Гл. 5, § 5.)
Влияние давления на низкочастотную диэлектрическую проницаемость ионных кристаллов.

3545. Mazur P., Montroll E. W., Potts R. B., Journ. Wash. Acad. Sci., 46, 2 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Влияние дефектов на колебания решетки. Локальные колебания в линейной двухатомной цепочке.
3546. Mazur P. (см. [3459, 3467]).
3547. Mead C. A., Phys. Rev., 110, 359 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория показателя преломления.
3548. Mead C. A., Spitzer W. G., Phys. Rev. Lett., 10, 471 (1963).
Положение уровня Ферми на поверхности полупроводника.
3549. Mead C. A., Spitzer W. G., Phys. Rev. Lett., 11, 358 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Минимумы зоны проводимости в AlAs и AlSb.
3550. Mead C. A., Spitzer W. G., Phys. Rev., 134, A713 (1964).
Положение уровня Ферми на границе раздела металл — полупроводник.
3551. Mead C. A. (см. [4442]).
3552. Megaw H. D., Acta Cryst., 5, 739 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Природа сегнетоэлектрических свойств титаната бария и других кристаллов типа перовскита.
3553. Мейкляр П. В., ФТТ, 4, 148 (1962). (Гл. 3, § 11.)
О поглощении света в галогенидах серебра.
3554. Meltzer V., Physica, 23, 118 (1957).
Новый метод в теории электропроводности твердых тел.
3555. Метогу J. D., Journ. Chem. Phys., 38, 1341 (1963).
Кольцевые токи в пентациклических углеводородах.
3556. Мень А. Н., Физ. мет. и металловед., 7, 450 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Спектр частот цепочки атомов при учете взаимодействия соседей любого порядка.
3557. Mendelson K. S., James H. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 729 (1964).
Волновые функции и энергии мелких акцепторных состояний в германии.
3558. Mendelssohn K., Montgomery H., Phil. Mag., 1, 718 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Рассеяние фононов и электронов дефектами в металле.
3559. Mendlowitz H., Proc. Phys. Soc., 75, 664 (1960). (Гл. 3, § 11; гл. 5 § 5.)
Оптические константы алюминия.
3560. Mendlowitz H. (см. [3236, 3494]).
3561. Mercurioff W., Compt. Rend., 253, 2502 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Наблюдение квантовых эффектов, связанных с циклотронным резонансом в валентной зоне германия.
3562. Mercurioff W., Phys. Status Solidi, 2, 282 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Исследование валентной зоны германия с помощью циклотронного резонанса. Квантовые эффекты.
3563. Merriam M. F., Phys. Rev. Lett., 11, 321 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Эффекты, связанные с зоной Вриллюэна, сверхпроводимость и поверхность Ферми индиевых сплавов. —
3564. Merton L. в сборнике «Semiconductors and Phosphors», Brunswick, Germany, 1958, p. 587. (Гл. 8, § 5.)
Расчет колебаний решетки в кристаллах со структурой цинковой обманки.
3565. Merton L., Zs. Naturforsch., 13a, 662, 1067 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Расчет колебаний решетки в кристаллах со структурой цинковой обманки. I. Колебания решетки без учета кулоновского поля. II. Влияние кулоновского поля на колебания решетки.

3566. Mertsching J., Phys. Status Solidi, 1, 345 (1961). (Гл. 3, § 9.)
К теории поглощения ультразвука в металлах в магнитном поле на высоких частотах.
3567. Messier J., Flores J. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 1539 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Температурная зависимость холловской подвижности и отношения μ_n/μ_p для Si.
3568. Meyer A., Phys. Rev., 116, 339 (1959).
Влияние спектра колебаний решетки на собственное электрическое и тепловое сопротивление металлов.
3569. Meyer A., Wood R. F., Phys. Rev., 133, A1436 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура M-центра в LiCl и LiF.
3570. Meyer H. J. G., Phys. Rev., 112, 298 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение электронами проводимости в германии.
3571. Meyer H. J. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 264 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Теория инфракрасного поглощения электронами проводимости в германии.
3572. Michel R. E., Rosenblum R., Phys. Rev. Lett., 7, 234 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Многокомпонентный магнетоплазменный резонанс в германии p-типа.
3573. Midzuno Y., Kihara T., Journ. Phys. Soc. Japan, 11, 1045 (1956). (Приложение 5, § 7.)
Неаддитивные внутримолекулярные силы в газах. I. Вандерваальсовы взаимодействия.
3574. Мигдал А. Б., ЖЭТФ, 34, 1438 (1958).
Взаимодействие электронов с колебаниями решетки в нормальном металле.
3575. Mikoshiba N., Journ. Phys. Soc. Japan, 13, 759 (1958).
О магнетоакустическом резонансе в металлах.
3576. Mikoshiba N., Journ. Phys. Soc. Japan, 14, 22 (1959).
Взаимодействие электронов проводимости с акустическими фононами.
3577. Mikoshiba N., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 341 (1963). (Гл. 3, § 10.)
Магнетосопротивление в слабом поле в простых полупроводниках в условиях прыжковой проводимости.
3578. Miller G. F., Musgrave M. J. P., Proc. Roy. Soc., A236, 352 (1956). (Гл. 8, § 5.)
О распространении упругих волн в эолотропных средах.
3579. Miller P. V., Haering R. R., Phys. Rev., 128, 126 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в металлах при H, нормальном к поверхности.
3580. Miller P. V., Phys. Rev. Lett., 11, 537 (1963).
Гигантские осцилляции затухания геликонов и альфвеновских волн.
3581. Miller P. V., Phys. Rev., 137, A1937 (1965). (Гл. 3, § 9.)
Теория затухания звука в изоляторах.
3582. Miller P. V. (см. [1886, 2897]).
3583. Miller R. A., Smith C. S., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 1279 (1964).
Производные по давлению от упругих постоянных LiF и NaF.
3584. Миллер Ю. Г., ФТТ, 3, 2383 (1961). (Гл. 2, § 4.)
Исследование явления электропереноса в металлах и полупроводниках под действием электрического поля Холла.

3585. Миронов А. Г., ФТТ, 3, 1654 (1961).
К теории электронной плазмы в магнитном поле. Влияние кулоновского взаимодействия на магнитную восприимчивость.
3586. Миронов А. Г. (см. [1309, 1314]).
3587. Mitchell D. L., Wallis R. F., Phys. Rev., 131, 1965 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Внутризонный эффект Фарадея в германии.
3588. Mitchell D. L. (см. [3814]).
3589. Mitchell E. W. J., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 444 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Обзор последних работ по алмазу.
3590. Mitchell E. W. J. (см. [1571, 2851]).
3591. Mitra G. B., Mitra S. K., Nature, 179, 1295 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Правило Грюнайзена и тепловое расширение металлов.
3592. Mitra G. B., Gokhale B. V., Journ. Chem. Phys., 26, 1655 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Упругие и силовые константы простого тетрагонального кристалла.
3593. Mitra S. S., Solid State Phys., 13, 2 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные спектры твердых тел.
3594. Мицкевич В. В., ФТТ, 3, 3022, 3036 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Динамическая теория ионных кристаллов типа NaCl. I. Тепловые и упругие свойства. II. Диэлектрические и оптические свойства.
3595. Мицкевич В. В., ФТТ, 4, 3035 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Инфракрасное поглощение и дисперсия в LiF и MgO.
3596. Мицкевич В. В., ФТТ, 5, 1552 (1963). (Гл. 8, § 5.)
О приближении Грюнайзена в уравнении состояния твердых тел и расчете некоторых свойств ионных кристаллов.
3597. Mitsui T., Phys. Rev., 111, 1259 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Теория сегнетоэлектрического эффекта в сегнетовой соли.
3598. Mitsui T. (см. [3699]).
3599. Miyaka wa K., Phys. Rev., 107, 677 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Новый вывод уравнений теории упругости для тригональных гомогенных кристаллов.
3600. Miyake S. J. Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 412 (1965). (Гл. 3, § 8.)
Теория уширения линии циклотронного резонанса. I. Локальная модуляция частоты, обусловленная примесями.
3601. Miyata T., Sapo R., Tomiko T., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 2233 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптические исследования кристаллов NaCl.
3602. Miya zawa H., Suzuki K., Maeda H., Phys. Rev., 131, 2442 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Данные относительно выпуклости изоэнергетической поверхности тяжелых дырок в кремнии в направлении [110].
3603. Moch P., Balkanski M., Aigrain P., Compt. Rend., 251, 1373 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура рутила, определенная из его оптических и электрических свойств.
3604. Mohanty G. P., Azaroff L. V., Phys. Rev., 120, 1224 (1960).
Распределение электронов в кристаллах CdS.
3605. Мой жес Б. Я., Образцов Э. Н., ЖТФ, 27, 1446 (1957).
К теории поперечного фотомагнитного эффекта.
3606. Мой жес Б. Я., ФТТ, 1, 1770 (1959). (Гл. 8, § 5.)
О нецентральных силах в теории колебаний кристаллической решетки.

3607. Мойжес Б. Я., Парфенов Р. В., Чудновский Ф. А., Эфрос А. Л., ФТТ, 3, 1933 (1961). (Гл. 8, § 5.)
 Приближенное вычисление средних групповых скоростей фононов в кубических кристаллах.
3608. Moliere G., Nuovo Cimento, 7, 720 (1958).
 Решение уравнения Больцмана для многократного рассеяния электронов (в пленках).
3609. Moliner F. G., Phil. Mag., 3, 207 (1958). (Гл. 3, § 11.)
 О поверхности Ферми в меди.
3610. Moll J. L., Proc. Inst. Rad. Eng., 46, 1076 (1958).
 Развитие теории вольт-амперных характеристик $p \rightarrow n$ -переходов.
3611. Montgomery H., Proc. Roy. Soc., A244, 85 (1958). (Гл. 3, § 11.)
 Теплопроводность свинца при низких температурах.
3612. Montgomery H. (см. [3558]).
3613. Montroll E. W., Journ. Chem. Phys., 15, 575 (1947). (Гл. 8, § 5.)
 Динамика квадратной решетки.
3614. Montroll E. W., Potts R. B., Phys. Rev., 100, 525 (1955). (Гл. 8, § 5; приложение 2, § 2.)
 Влияние дефектов на колебания решетки.
3615. Montroll E. W., Potts R. B., Phys. Rev., 102, 72 (1956). (Гл. 8, § 5; приложение 2, § 2.)
 Влияние дефектов на колебания решетки; взаимодействие дефектов и аналогия с теорией мезонных пар.
3616. Montroll E. W. (см. [1822, 1823, 3467, 3545]).
3617. Moore E. J., Australian Journ. Phys., 11, 235 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
 К вопросу о гальваномагнитных, термомагнитных и термоэлектрических эффектах в изотропных металлах и полупроводниках.
3618. Moore N., Journ. Chem. Phys., 33, 471 (1960). (Приложение 5, § 6.)
 Энергия взаимодействия двух атомов гелия.
3619. Moore T. W., Spong F. W., Phys. Rev., 125, 846 (1962); 126, 2261 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
 Циклотронный резонанс в Al.
3620. Moore T. W. (см. [2895, 3172, 3173]).
3621. Mooser E., Zs. Angew. Math. Phys., 4, 433 (1953).
 Прибор для графического определения энергии Ферми в полупроводниках.
3622. Mooser E., Phys. Rev., 100, 1589 (1955).
 Магнитная восприимчивость электронов и дырок, захваченных примесями в полупроводниках.
3623. Mooser E. (см. [2044, 2628]).
3624. Mogel P., Phys. Rev. Lett., 1, 244 (1958).
 Оценка роли процессов переброса в электрон-фононном взаимодействии.
3625. Morgan T. N., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 1657 (1963).
 Приложение принципа неопределенности к рассеянию электронов на фононах в твердых телах.
3626. Mori H., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 9, 473 (1953).
 Квазистатистическая теория явлений переноса. II. К теории металлической проводимости.
3627. Mori H., Journ. Phys. Soc. Japan, 11, 1029 (1956).
 Квантостатистическая теория явлений переноса.
3628. Mori H., Ross J., Phys. Rev., 109, 1877 (1958).
 Уравнение в квантовых газах.

3629. Mori S., Shigetomi S., Koga Y., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **18**, 308 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства InSc.
3630. Morimoto T., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **20**, 500 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Трехзонная модель гальваномагнитных эффектов в висмуте.
3631. Morin F. J., Geballe T. H., Herring C., *Phys. Rev.*, **105**, 525 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Температурная зависимость пьезосопротивления кремния и германия высокой чистоты.
3632. Morin F. J. (см. [2604]).
3633. Morita A., *Journ. Phys. Soc. Japan*, **18**, 1437 (1963).
Теория примесных уровней. II. Полярные кристаллы.
3634. Morita A. (см. [898]).
3635. Morris R. G., Redin R. D., Danielson G. C., *Phys. Rev.*, **109**, 1909 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Полупроводящие свойства монокристаллов Mg_2Si .
3636. Morris R. G. (см. [4074]).
3637. Morrison S. R., *Phys. Rev.*, **104**, 619 (1956).
Рекомбинация электронов и дырок на дислокациях.
3638. Morrison S. R. (см. [1113]).
3639. Morse R. W., *Phys. Rev.*, **97**, 1716 (1955). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука в металлах, обусловленное релаксацией электронов.
3640. Morse R. W., Bohm H. V., Gavenda J. D., *Phys. Rev.*, **109**, 1394 (1958). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Резонансы электронов с ультразвуковыми волнами в меди.
3641. Morse R. W., Gavenda J. D., *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 250 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнитные осцилляции затухания ультразвука в кристалле меди при низких температурах.
3642. Morse R. W., *Prog. Cryog.*, **1**, 219 (1959). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука в металлах при низких температурах.
3643. Morse R. W., Myers A., Walker C. T., *Phys. Rev. Lett.*, **4**, 605 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхности Ферми золота и серебра по данным о затухании ультразвука.
3644. Morse R. W., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 214. (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхности Ферми благородных металлов, определенные с помощью ультразвука.
3645. Morse R. W., Myers A., Walker C. T., *Journ. Acoust. Soc. Amer.*, **33**, 699 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
О формах поверхностей Ферми благородных металлов, определенных с помощью ультразвука.
3646. Moskowitz A., *Rev. Mod. Phys.*, **32**, 440 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Анализ кривых вращательной дисперсии.
3647. Moskowitz J. W., *Journ. Chem. Phys.*, **38**, 677 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Изучение кольца H_2 в приближениях молекулярных орбит и альтернантных молекулярных орбит.
3648. Moskowitz J. W., Barnett M. P., *Journ. Chem. Phys.*, **38**, 1557 (1963). (Гл. 10, § 4.)
П-электронная структура молекулы бензола.
3649. Moss T. S., *Proc. Inst. Rad. Eng.*, **43**, 1869 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводники из солей свинца.
3650. Moss T. S., *Proc. Phys. Soc.*, **B68**, 697 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Измерения на $p-n$ -переходах в сульфиде свинца.

3651. Moss T. S., Proc. Phys. Soc., **V70**, 247 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Теория спектрального распределения рекомбинационного излучения из InSb.
3652. Moss T. S., в сборнике «Semiconductors and Phosphors», Brunswick, Germany, 1958, p. 98.
Фотоэлектромагнитный эффект и эффект магнетозапорного слоя.
3653. Moss T. S., Walton A. K., Proc. Phys. Soc., **74**, 131 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Определение эффективной массы электронов в GaAs с помощью эффекта Фарадея в инфракрасной области.
3654. Moss T. S., Walton A. K., Physica, **25**, 1142 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Измерение эффективной массы электронов в InP с помощью эффекта Фарадея в инфракрасной области.
3655. Moss T. S., Proc. Phys. Soc., **74**, 490 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Степень ионной связи в теллуриде кадмия.
3656. Moss T. S., Smith S. D., Taylor K. W., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 323 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Фарадея на свободных носителях, в антимониде индия в инфракрасной области.
3657. Moss T. S., Journ. Appl. Phys., **32** (Suppl.), 2136 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Край оптического поглощения в GaAs и его зависимость от электрического поля.
3658. Moss T. S., Ellis B., Proc. Phys. Soc., **83**, 217 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Фарадея в инфракрасной области в AlSb, *n*-GaP и в легированном GaP.
3659. Moss T. S. (см. [4381, 4796, 4797]).
3660. Motizuki K., Sparks M., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 486 (1964).
Глубина проникновения возбужденных электронов и дырок в металлах и полупроводниках.
3661. Mott N. F., Trans. Faraday Soc., **43**, 429 (1947).
Теория образования защитных окисных пленок на поверхностях материалов. III.
3662. Mott N. F., Photo. Journ., **B88**, 119 (1948).
Замечания к теории скрытого изображения.
3663. Mott N. F., Rep. Brit. Electr. Res. Assoc., Ref. L/7216, 1949.
Замечания к вопросу о транзисторе и поверхностных состояниях в полупроводниках.
3664. Mott N. F., Proc. 10th Solvay Congr., Brussels, 1954, p. 67.
Дискуссия.
3665. Mott N. F., Nature, **178**, 1205 (1956).
Теоретическая химия металлов.
3666. Mott N. F., T w o s e W. D., Adv. Phys., **10**, 107 (1961).
Теория примесной проводимости.
[См. перевод: УФН, **79**, вып. 4, 691 (1963).]
3667. Mott N. F., Proc. Roy. Soc., **A275**, 149 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Атомная физика и прочность металлов.
3668. Mott N. F., Adv. Phys., **13**, 325 (1964).
Электроны в переходных металлах.
3669. Mott N. F. (см. [3418]).
3670. Мотулевич Г. П., Шубин А. А., ЖЭТФ, **34**, 757 (1958).
О роли межэлектронных соударений в металлах в инфракрасной области спектра.
3671. Мотулевич Г. П., ЖЭТФ, **37**, 1770 (1959). (Гл. 5, § 5.)
О связи оптических постоянных металлов с их микрохарактеристиками.

3672. Mrozkowski S., Journ. Chem. Phys., **21**, 492 (1953). (Гл. 3, § 11.)
Электрическое сопротивление соединений внедрения графита.
3673. Mugaо T., Journ. Phys. Soc. Japan, **17**, 341 (1962).
Экранирование мультипольных взаимодействий в металлах.
3674. Murphy E. L., Good R. H., Phys. Rev., **102**, 1464 (1956).
Термоионная эмиссия, холодная эмиссия и переходная область.
3675. Miggell J. N., Mol. Phys., **4**, 205 (1961).
Подвижность дырок и электронов в органических кристаллах.
3676. Müsser H. A., Zs. Phys., **148**, 380 (1957).
Термодинамическая трактовка электронных процессов в полупроводниковых поверхностных слоях.
3677. Musgrave M. J. P., Pople J. A., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 321 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Устойчивость кристаллов со структурой алмаза и цинковой обманки под давлением.
3678. Musgrave M. J. P., Proc. Roy. Soc., **A272**, 503 (1963).
О связи между серым и белым оловом (α -Sn и β -Sn).
3679. Musgrave M. J. P., Proc. Phys. Soc., **84**, 585 (1964).
О связи между критическим давлением и шириной запрещенной зоны полупроводников.
3680. Musgrave M. J. P. (см. [3578]).
3681. Muto T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **4**, 181, 243 (1949). (Гл. 3, § 11.)
Теория F -центров окрашенных щелочногалогидных кристаллов. I. Структура F -зон поглощения. II. Электронная структура F -центров — общая теория.
3682. Muto T., Oyama S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **5**, 833, (1950).
Теория температурного сдвига электронных энергетических зон в кристаллах.
3683. Мясникова Т. П., Юценко А. Ф., ФТТ, **4**, 653 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Изменения в инфракрасных спектрах NH_4HSO_4 , RbHSO_4 , $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ при сегнетоэлектрических переходах.
3684. Мясникова Т. П. (см. [1153]).
3685. Myers A., Amed. Journ. Phys., **29**, 143 (1961). (Гл. 3, § 9.)
Применение высокочастотных звуковых волн для исследования некоторых электронных свойств металлов.
3686. Myers A. (см. [3643, 3645]).
3687. Myszkowski A., Gornulka S., Phys. Rev., **134**, A1102 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Взаимодействие электрона на донорном центре с кристаллической решеткой в германии и кремнии.
3688. Nabaгго F. R. N., Phil. Mag., **2**, 716 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Отношение осей в цинке и η - и ϵ -латунях.
3689. Nabaгго F. R. N., Ziman J. M., Proc. Phys. Soc., **78**, 1512 (1961).
Рассеяние волн дислокациями.
3690. Nag B. R., Das P., Pагiа H., Proc. Phys. Soc., **81**, 736 (1963). (Гл. 2, § 4.)
Холловская подвижность и магнетосопротивление горячих носителей в полупроводниках в высоких магнитных полях.
3691. Nagamiya T., Journ. Phys. Soc. Japan, **7**, 354, 358 (1952). (Гл. 5, § 5.)
Теория центров окраски.
3692. Nagamiya T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **7**, 275 (1952). (Гл. 8, § 5.)
К теории диэлектрических, пьезоэлектрических и упругих свойств $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$.

3693. Nagamiya T. (см. [3013]).
3694. Nagu E., Journ. Phys. Rad., 17, 773 (1956).
Электролюминесцентные явления.
3695. Nagu K., Acta Phys. Hung., 5, 95 (1955). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория электромагнитного излучения в диэлектриках.
3696. Nakajima S., Proc. Phys. Soc., A69, 441 (1956).
Замечание о корреляции в импульсном пространстве и диамагнетизме.
3697. Nakajima S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 23, 694 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Замечание о комплексной электропроводности нормальных металлов.
3698. Nakajima S. (см. [2144, 3112]).
3699. Nakamura E., Mitsui T., Furuichi J., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 1477 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Замечание о классификации сегнетоэлектриков.
3700. Nakano H., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 15, 77 (1956).
Метод расчета электропроводности.
3701. Nardelli G. F., Terzi N., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 815 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные свойства вакансии в гранцентрированных кубических решетках Борна — Кармана.
3702. Nardi V., Nuovo Cimento, 7, 545 (1958).
О движениях атомов в квазикристаллическом аргене.
3703. Narita S., Sugiyama, Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 153 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Некоторые оптические свойства кристаллов ZnS.
3704. Nash H. C., Smith C. S., Journ. Phys. Chem. Solids, 9, 113, (1959). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные монокристаллов лития.
3705. Наследов Д. Н., Слободчиков С. В., ФТТ, 4, 2755 (1962).
Об электрических свойствах кристаллов GaP.
3706. Наследов Д. Н. (см. [4964]).
3707. Nathan N. I., Paul W., Brooks H., Phys. Rev., 124, 391 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Межзонное рассеяние в германии n-типа.
3708. Nava R., Azrt R., Ciccarello I., Dransfeld K., Phys. Rev., 134, A581 (1964).
Поглощение гиперзвука в кварце при температурах ниже 30° К.
3709. Nelms A. T., Oppenheim I., Journ. Res. Natl. Bur. Stand., 55, 53 (1955). (Гл. 6, § 2.)
Данные по атомному формфактору: расчет и обзор.
3710. Nelson J. R., Phys. Rev., 99, 1902 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Спектр оптического поглощения MgO по данным об отражении.
3711. Nelson R. C., Journ. Chem. Phys., 29, 388 (1958).
Органические фотопроводники IV. Знак носителей заряда.
3712. Nelson R. C., Journ. Chem. Phys., 30, 406 (1959).
Органические фотопроводники. V. Модель фотопроводимости в катионных красителях.
3713. Немнонов С. А., Финкельштейн Л. Д., Физ. мет. и металловед., 9, 530 (1960).
О характере межатомного взаимодействия в гидридах некоторых переходных металлов.
3714. Немошкаленко В., ДАН СССР, 143, 1328 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Структура энергетического спектра электронов в сплавах железо — кобальт.

3715. Немошкаленко В. (см. [1320, 1321]).
3716. Геронова Н. Н., Белов Н. В., ДАН СССР, **129**, 556 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Симметрия сегнетоэлектриков.
3717. Nesbet R. K., Phys. Rev., **109**, 1632 (1958). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Теория Бракнера и метод наложения конфигураций.
3718. Neuberger J., Hatcher R. D., Jour. Chem. Phys., **33**, 265 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Частотный спектр двумерной решетки.
3719. Neuringer L. J., Phys. Rev., **113**, 1495 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Влияние давления на инфракрасное поглощение в полупроводниках.
3720. Newell G. F., Jour. Chem. Phys., **21**, 1877 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Спектр колебаний простой кубической решетки.
3721. Newell G. F., Jour. Chem. Phys., **24**, 1049 (1956); **27**, 240 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Спектр колебаний графита и нитрида бора. I. Двумерный спектр.
II. Трехмерный спектр
3722. Newell G. F., Jour. Phys. Chem. Solids, **6**, 190 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Предельные частоты колебаний решетки неупорядоченных бинарных сплавов.
3723. Newell G. F. (см. [2242, 4145]).
3724. Newman P., Tyler W. W., Phys., Rev., **105**, 885 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Влияние примесей на инфракрасное поглощение свободными дырками в германии p -типа.
3725. Newman P., Chrenko R. M., Phys. Rev., **114**, 1507 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства окиси никеля.
3726. Newman P. (см. [1702]).
3727. Nicholas J. F., Proc. Phys. Soc., **A66**, 201 (1953). (Гл. 10, § 4.)
Влияние энергии Ферми на стабильность сверхрешеток.
3728. Nicholson A. F., Proc. Phys. Soc., **84**, 425 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Продольные волны в атомной цепочке с произвольным потенциалом.
3729. Niehrs H., Zs. Phys., **156**, 446 (1959).
Операторы электронной дифракции от кристаллической решетки.
3730. Niegernberg W. A., Jour. Chem. Phys., **19**, 659 (1951). (Гл. 8, § 5.)
Новый подход к расчету кристаллических частот.
3731. Nigam A. N., Zs. Phys., **147**, 264 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Центры окраски и рентгеновские спектры кристаллов галогенидов натрия.
3732. Nii R., Jour. Phys. Soc. Japan, **18**, 456 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс Азбеля—Канера в $PbTe$ n -типа.
3733. Nii R., Jour. Phys. Soc. Japan, **19**, 58 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронное поглощение в $PbTe$.
3734. Nii R. (см. [2767, 2768]).
3735. Никифоров И. Я., Физ. мет. и металловед., **11**, 927 (1961). (Гл. 3, § 11.)
О форме зоны проводимости железа.
3736. Nilsson-Fröman N., Arkiv Fys., **16**, 329 (1960).
О двухфононном рассеянии рентгеновских лучей в алюминии.
3737. Nishina Y., Kolodziejczak J., Lax V., Phys. Rev. Lett., **9**, 55 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Осцилляции межзонного фарадеевского вращения и эффект Фогта в полупроводниках.
3738. Nishina Y. (см. [2457, 3008, 3202, 3204]).

3739. Nishiyama T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **6**, 897 (1951).
О взаимодействии колебаний решетки с электронами проводимости.
3740. Nishiyama T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **14**, 37 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Теория звуковых волн и коллективное описание.
3741. Nishiyama T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **21**, 389 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Электростатические взаимодействия в электронно-ионном газе высокой плотности.
3742. Ницович М. В., Физ. мет. и металловед., **7**, 641 (1959).
К теории диамагнетизма электронного газа в кристаллах.
3743. Ницович М. В. (см. [4195]).
3744. Ницович В. М., ЖТФ, **28**, 1201 (1958).
К теории кинетических явлений в полупроводниках с узкой примесной зоной.
3745. Ницович В. М. (см. [4192]).
3746. Нормантос Е., Пикус Г. Е., ФТТ, **4**, 2692 (1962).
Термагнитные эффекты в полупроводниках с вырожденными зонами.
3747. Нормантос Е. (см. [1228]).
3748. Northrop F. C., Proc. Phys. Soc., **74**, 756 (1959).
Процессы проводимости в конденсированных ароматических углеводородах.
3749. Nozières P., Compt. Rend., **244**, 2236 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Коллективное описание электронов в твердых телах.
3750. Nozières P., Pines D., Phys. Rev., **109**, 741 (1958); **109**, 762 (1958), **109**, 1062 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Взаимодействие электронов в твердых телах. Общая формулировка. Метод коллективного описания в задаче о диэлектрической проницаемости. Природа элементарных возбуждений.
3751. Nozières P., Pines D., Phys. Rev., **109**, 1009 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Энергия основного состояния и тормозная способность электронного газа.
3752. Nozières P., Phys. Rev., **109**, 1510 (1958). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в графите.
3753. Nozières P., Pines D., Phys. Rev., **111**, 442 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Корреляционная энергия газа свободных электронов.
3754. Nozières P., Pines D., Nuovo Cimento, **9**, 470 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Диэлектрическая формулировка проблемы многих тел: приложение к газу свободных электронов.
3755. Nozières P., App. Phys., **4**, 865 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Влияние кулоновского взаимодействия на элементарные возбуждения в твердых телах.
3756. Nozières P., Pines D., Phys. Rev., **113**, 1254 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Взаимодействие электронов в твердых телах. Спектр характеристических энергетических потерь.
3757. Нраньян А. А., ФТТ, **5**, 1865 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные третьего порядка кристаллов типа CsCl.
3758. Нраньян А. А., ФТТ, **6**, 785 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Соотношения Коши для упругих постоянных третьего порядка.
3759. Нраньян А. А. (см. [2392]).
3760. Numata H., Uemura Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 2140 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Анализ циклотронного поглощения в РbTe.

3761. Образцов Ю. Н., ЖТФ, 25, 995 (1955). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Нернста в атомных полупроводниках при учете рассеяния электронов и дырок на ионах примеси.
3762. Образцов Ю. Н., Мочан И. В., Смирнова Т. В., ФТТ, 2, 830 (1960). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Фононный поперечный термомагнитный эффект Нернста у дырочного германия.
3763. Образцов Ю. Н. (см. [3605]).
3764. Осктап N., Adv. Phys., 7, 199 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Инфракрасные и рамановские спектры льда.
3765. O'Dwyer J. J., Proc. Phys. Soc., B69, 685 (1956).
Замечание о функции распределения электронов в изоляторах в сильном электрическом поле.
3766. O'Dwyer J. J., Nagler P. G., Phys. Rev., 105, 399 (1957).
Безызлучательные переходы захваченных электронов в полярных кристаллах.
3767. Ohta T., Miyakawa T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 22, 893 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Форма линий межзонного магнетооптического поглощения в полупроводниках.
3768. Ohta T., Nagaе M., Miyakawa T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 23, 229 (1960). (Гл. 3, § 8.)
Теория формы линий межзонного магнетооптического поглощения в полупроводниках.
3769. Ohta T., Miyakawa T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 24, 1378 (1960). (Гл. 3, § 8.)
Уширение уровней Ландау за счет столкновений.
3770. Okada T., Mem. Fac. Sci. Kyushu Univ., B1, 168 (1955). (Гл. 2, § 4.)
Эллипсоидальная модель гальваномагнитных эффектов в полупроводниках.
3771. Okada T., Mem. Fac. Sci. Kyushu Univ., B2, 1 (1956). (Гл. 2, § 4.)
Теория эффекта Холла в полярных полупроводниках.
3772. Okada T., Journ. Phys. Soc. Japan, 12, 1327 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Измерение гальваномагнитных тензоров висмута.
3773. Okada T., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 428 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства и кристаллическая структура интерметаллических соединений типа IV_b-VI_b .
3774. Okamura K., Templeton I. M., Phil. Mag., 7, 1239 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в рубидии.
3775. Okasaki C., Suita T., Journ. Phys. Soc. Japan, 6, 200 (1951).
Электропроводность ионных кристаллов. I.
3776. Осотский В. С., ФТТ, 3, 2918 (1961).
Метод однородной статической деформации для вычисления упругого пьезоэлектрического и диэлектрического тензоров ионного кристалла.
3777. Okazaki M., Journ. Phys. Soc. Japan, 17, 1865 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Уровни Ландау и циклотронный резонанс дырок в германии.
3778. Oliver D. J., Proc. Phys. Soc., B70, 244 (1957).
Флуктуации числа электронов и дырок в полупроводнике.
3779. Olmer P., Acta Cryst., 1, 57 (1948). (Гл. 8, § 1 и 6.)
Дисперсия скорости акустических волн в алюминии.

3780. Olmer P., Bull. Soc. Franc. Mineral., 71, 145 (1948). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 1 и 6.)
Фотон-фононное взаимодействие и диффузия рентгеновских лучей в алюминии.
3781. Olsen J. L., Rosenberg H. M., Adv. Phys., 2, 28 (1953).
Теплопроводность металлов при низких температурах.
3782. Olsen J. L., Rinderer L., Nature, 173, 682 (1954). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление меди до 150 000 эрстед при 4,2° К.
3783. Olsen T., Journ. Phys. Chem. Solids, 12, 167 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Решеточная теплопроводность в медных сплавах.
3784. Olsen T., Phys. Rev., 118, 1007 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Электронная структура олова, определенная по затуханию ультразвука.
3785. Olsen T., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 237. (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми олова по данным о затухании ультразвука.
3786. Olsen T., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 187 (1963). (Гл. 3, § 9.)
Затухание продольных звуковых волн на электронах проводимости.
3787. Olsen T., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 649 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми белого олова по магнетоакустическим данным.
3788. Olson R., Rodriguez S., Phys. Rev., 108, 1212 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление монокристаллов меди.
3789. Olszewski S., Phys. Rev., 121, 42 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Упрощенные уравнения самосогласованного поля с учетом корреляции.
3790. Onsager L., Phil. Mag., 43, 1006 (1952). (Гл. 3, § 3 и 9.)
Интерпретация эффекта де Гааза — ван Альфена.
3791. Onuki M., Hase N., Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 171 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Холловская подвижность дырок в кристаллах CdS.
3792. Orlik U., Gryse M. H. L., Proc. Soc., A239, 425 (1957).
Исследование эффекта Яна — Теллера. I. Обзор статической задачи.
3793. Oriani R. A., Journ. Phys. Chem. Solids, 2, 327 (1957).
Обзор теоретических моделей первичных металлических растворов.
3794. Osaka Y., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 652 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Константа перенормировки для электронного газа.
3795. Osaka Y., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 877 (1963). (Гл. 3, § 9.)
Затухание ультразвука в нормальных металлах.
3796. Osaka Y., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 436 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Влияние кулоновского взаимодействия на затухание ультразвука.
3797. Osaka Y. (см. [898]).
3798. Otsuka E., Nagata S., Murase K., Yonemitsu K., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 1502 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в германии, легированном оловом.
3799. Otsuka E., Nagata S., Murase K., Kawamura H., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 1503 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в сплавах Ge—Si.
3800. Overhauser A. W., Gorman R. L., Phys. Rev., 102, 676 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Сопротивление, обусловленное атомами внедрения и вакансиями в меди.

3801. Overhauser A. W., Schindler A. I., Journ. Appl. Phys., **28**, 544 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электрическое сопротивление никелево-палладиевых сплавов.
3802. Overhauser A. W. (см. [1345, 1346, 1794, 1925, 1926, 3414]).
3803. Overton W. C., Jr., Berlincourt T. G., Phys. Rev., **99**, 1165 (1955). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Зависимость параметров эффекта де Гааза — ван Альфена в висмуте от давления.
3804. Overton W. C., Phys. Rev., **118**, 851 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Решение секулярного уравнения на границах зоны Бриллюэна для колебаний гранецентрированной кубической решетки.
3805. Овсянникова И. А., Широбоков М. Я., ЖЭТФ, **28**, 695 (1955).
К динамической теории рассеяния электронов в кристаллах.
3806. Palevsky H., Hughes D. J., Kley W., Tunkelo E., Phys. Rev. Lett., **2**, 258 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Колебания решетки кремния по данным о рассеянии холодных нейтронов.
3807. Palevsky H. (см. [1518, 1519, 1942, 2248, 2624, 2696, 3862]).
3808. Palik E. D., Pícus G. S., Teitler S., Wallis R. F., Phys. Rev., **122**, 475 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в InSb в инфракрасной области
3809. Palik E. D., Wallis R. F., Phys. Rev. **123**, 131 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в InAs и InP *n*-типа в инфракрасной области.
3810. Palik E. D., Stevenson J. R., Wallis R. F., Phys. Rev., **124**, 701 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронное резонансное поглощение в *n*-GaAs в инфракрасной области.
3811. Palik E. D., Teitler S., Wallis R. F., Journ. Appl. Phys., **32** (Suppl.), 2132 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс на свободных носителях, фарадеевское вращение и двойное преломление Фогта в сложных полупроводниках.
3812. Palik E. D., Pícus G. S., Teitler S., Wallis R. F., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 587. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронное резонансное поглощение в сложных полупроводниках в инфракрасной области.
3813. Palik E. D., Stevenson J. R., Phys. Rev., **130**, 1344 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в *n*-InAs в инфракрасной области.
3814. Palik E. D., Mitchell D. L., Zemel J. N., Phys. Rev., **135**, A763 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Магнетооптические исследования зонной структуры PbS.
3815. Ramplin V. R., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 675 (1964).
Систематический метод получения новых полупроводниковых соединений методом структурной аналогии.
3816. Панченко В. В., ФТТ, **6**, 584 (1964).
Температурная зависимость диэлектрической постоянной ионных кристаллов.
3817. Раганжаре В. В., Proc. Phys. Soc., **80**, 971 (1962).
Усиление решеточного рассеяния в полупроводниках, обусловленное электрическим полем.
3818. Раганжаре В. В., Phys. Lett., **5**, 32 (1963).
Усиление звуковых волн в полупроводниках.
3819. Раганжаре В. В. (см. [2143, 2144]).

3820. Парфеньев Р. В., Погарский А. М., Фарбштейн И. И., Шалыт С. С., ФТТ, 4, 3596 (1962). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные свойства теллура, структура валентной зоны.
3821. Парфеньев Р. В. (см. [3607]).
3822. Parker R. A., Phys. Rev., 124, 1713 (1961). (Гл. 5, § 5.)
Лоренцевы поправки в рутиле.
3823. Parkinson D., Proc. Phys. Soc., 75, 169 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Атомные поляризуемости.
3824. Parmenter R. H., Phys. Rev., 113, 102 (1959).
Акустозлектрический эффект.
3825. Parrott J. E., Proc. Phys. Soc., B70, 590 (1957).
Некоторые замечания к теории электропроводности, теплопроводности и термо-э. д. с. полупроводников.
3826. Parrott J. E., Proc. Phys. Soc., 71, 82 (1958).
Теория эффекта Нернста в полупроводниках.
3827. Parrott J. E. (см. [4139]).
3828. Parry W. E., Turgler R. E., Rep. Progr. Phys., 27, 23 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Функции Грина в статической механике.
3829. Parthasarathy S., Guruswamy D. S., Desmukh A. P., Ann. Phys., 17, 170 (1956). (Гл. 8, § 1.)
Связь бриллюэновских компонент в рассеянии света с поглощением звука.
- 3829a. Paskin A., Acta Cryst., 11, 165 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Вклады одно- и двухфононного рассеяния в тепловое диффузное рассеяние.
3830. Paskin A., Weiss R. J., Phys. Rev. Lett., 9, 199 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Вид поверхности Ферми в свинце.
3831. Paskin A. (см. [2490]).
3832. Patrick L., Phys. Rev., 127, 1878 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Неэквивалентные узлы и уровни многовалентных доноров и акцепторов в кристаллах типа SiC.
3833. Patrick L. (см. [1558]).
3834. Paul D. I., Phys. Rev., 111, 1086 (1958).
Неравновесное распределение фононов в металлах.
3835. Paul H., Zs. Naturforsch., 14a, 535, 540 (1959).
Теория теплопроводности изоляторов. I. II.
3836. Paul W., Warschauer D. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 5, 89, (1958). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства полупроводников, находящихся под гидростатическим давлением. I. Германий.
3837. Paul W., Warschauer D. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 5, 102 (1958). (Гл. 3, § 11.)
II. Кремний.
3838. Paul W., Warschauer D. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 6, 6 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства полупроводников, находящихся под гидростатическим давлением. III. Сплавы германия с кремнием.
3939. Paul W., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 196 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Влияние давления на свойства германия и кремния.
3840. Paul W., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2082 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура интерметаллических полупроводников по данным опытов с давлением.
3841. Paul W. (см. [1179, 1495—1497, 1763, 2385, 3707, 4918]).

3842. Pauncz R., de Heer J., Löwdin P. O., Journ. Chem. Phys., **36**, 2247, 2257 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Исследования по методу альтернантных молекулярных орбит. I. Общее выражение для энергии альтернантной системы со структурой замкнутой оболочки. II. Приложение к циклическим системам.
3843. Pauncz R., Journ. Chem. Phys., **37**, 2739 (1962). (Гл. 10, § 4.)
Исследования по методу альтернантных молекулярных орбит. IV. Обобщение метода на случай состояний различной мультиплетности.
3844. Pauncz R., в книге «Molecular Orbitals in Chemistry, Physics, and Biology», Löwdin P. O., Pullmann B. (eds.), New York, 1964, p. 433. (Гл. 10, § 4.)
Метод альтернантных молекулярных орбит и проблема корреляции.
3845. Pauncz R. (см. [1730]).
3846. Pearson G. L., Herring C., Physica, **20**, 975 (1954). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление и зонная структура монокристалла кремния.
3847. Pearson G. L., Brattain W. H., Proc. Inst. Rad. Eng., **43**, 1794 (1955).
История исследования полупроводников.
3848. Pearson W. B., Phys. Rev., **97**, 666 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Сопротивление и термоэлектрические измерения меди, подвергнутой холодной обработке, и минимум сопротивления при низких температурах.
3849. Pearson W. B., Canad. Journ. Phys., **35**, 886 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства соединений со структурой арсенида никеля.
3850. Pearson W. B., Canad. Journ. Phys., **36**, 631 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Валентное состояние металлического свинца.
3851. Pearson W. B., Canad. Journ. Phys., **37**, 1191 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Энергии активации полупроводников со структурой цинковой обманки.
3852. Pearson W. B., Canad. Journ. Phys., **38**, 1048 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Низкотемпературная термо-э. д. с. серебра и золота, отожженных и подвергнутых холодной обработке.
3853. Pearson W. B., ФТТ, **3**, 1411 (1961).
Обзор исследований термоэлектрических свойств металлов первой группы при низких температурах, проведенных в Национальных исследовательских лабораториях в Оттаве.
3854. Pearson W. B., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 103 (1962).
Относительные атомные размеры в химии полупроводников.
3855. Pearson W. B., Acta Met., **10**, 1123 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Замечания к «Доказательству металлической связи в TiN».
3856. Pearson W. B. (см. [1159, 2293, 3403, 3404]).
3857. Pease R. S., Vason G. E., Nature, **173**, 443 (1954). (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектрическая структура дигидрофосфата калия.
3858. Pease R. S. (см. [1064, 1067]).
3859. Пекар С. И., ЖЭТФ, **18**, 525 (1948). (Гл. 11, § 7.)
Кристалл как многоэлектронная проблема и одноэлектронное приближение.
3860. Пекар С. И., ЖТФ, **25**, 2030 (1955).
Состояние некоторых вопросов теории полупроводников и диэлектриков и пути дальнейшего развития теории.
3861. Пекар С. И. (см. [1445, 1978, 3087, 3284]).
3862. Pelah I., Eisenhauer C. M., Hughes D. J., Palevsky H., Phys. Rev., **108**, 1091 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Определение оптических колебаний решетки Ge и ZrH с помощью рассеяния холодных нейтронов.

3863. Pelah I., Lefkowitz W., Kley W., Tunkelo E., Phys. Rev Lett., 2, 94 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Наблюдение колебательных частот водорода в фосфатах с помощью неупругого рассеяния холодных нейтронов.
3864. Pelah I. (см. [1942, 2248]).
3865. Penfield R. H., Zatzkis H., Journ. Franklin Inst. 263, 331 (1957). (Приложение 5, § 7.)
Квантование релятивистского гармонического осциллятора по теории возмущений с приложением к вандерваальсовым силам.
3866. Penn D. R., Phys. Rev., 128, 2093 (1962).
Зависящая от волнового числа диэлектрическая проницаемость полупроводников.
3867. Peretti J., Compt. Rend., 241, 461 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Метод расчета спектральной плотности собственных частот колебаний кристаллической решетки.
3868. Peretti J., Compt. Rend., 241, 544 (1955). (Гл. 8, § 5.)
О частотном спектре кристаллической решетки. Метод приближенного решения интегрального уравнения для спектра.
3869. Peretti J., Compt. Rend., 242, 1852 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Расчет амплитуды колебаний атомов идеального кристалла как функции температуры.
3870. Peretti J., Journ. Phys. Chem. Solids, 12, 216 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Некоторые замечания о частотных спектрах кристаллических решеток.
3871. Перлин Ю. Е., ЖЭТФ, 32, 105 (1957).
Захват электронов проводимости заряженными дефектами ионных кристаллов.
3872. Perry C. H., Khanna B. N., Rupprecht G., Phys. Rev., 135, A408 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Исследования титанатов перовскита в инфракрасной области.
3873. Resnak L., Phys. Rev., 79, 171 (1950). (Гл. 3, § 11.)
Проводимость селена, вызванная облучением электронами.
3874. Peterson S. W., Levy H. A., Simpson S. H., Journ. Chem. Phys., 21, 2084 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Исследование дигидрофосфата калия с помощью дифракции нейтронов.
3875. Peterson S. W. (см. [3274]).
3876. Petritz R. L., Phys. Rev., 104, 1508 (1956).
Теория фотопроводимости полупроводниковых пленок.
3877. Petritz R. L., Phys. Rev., 110, 1254 (1958).
Теория эксперимента по измерению подвижности и плотности носителей в области пространственного заряда у поверхности полупроводника.
3878. Petritz R. L. (см. [2629, 2630, 3363, 4929]).
3879. Pfennig H., Zs. Phys., 155, 332 (1959).
Влияние процессов переброса на электрическое сопротивление металлов при низких температурах.
3880. Phariseau P., Physica, 23, 651 (1957). (Гл. 8, § 1.)
Дифракция света на двух перпендикулярных ультразвуковых волнах.
3881. Phariseau P., Ziman J. M., Phil. Mag., 8, 1487 (1963).
Теория электронной структуры жидких металлов.
3882. Philipp H. R., Ehrenreich H., Phys. Rev. Lett., 8, 92 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Наблюдение d -зон в полупроводниках типа $A^{III}B^V$.

3883. Philipp H. R., Ehrenreich H., Phys. Rev., **129**, 1550 (1963). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства полупроводников.
3884. Philipp H. R., Ehrenreich H., Phys. Rev., **131**, 2016 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Собственные оптические свойства галогенидов щелочных металлов.
3885. Philipp H. R., Taft E. A., Phys. Rev., **136**, A1445 (1964). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Анализ данных по отражению для алмаза с помощью соотношений Крамерса — Кронига.
3886. Philipp H. R. (см. [1640, 1935—1939, 4578, 4579]).
3887. Phillips J. C., Phys. Rev., **104**, 1263 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Критические точки и спектры колебаний решетки.
3888. Phillips J. C., Rosenstock H. B., Journ. Phys. Chem. Solids, **5**, 288 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Топологические методы локализации критических точек.
3889. Phillips J. C., Journ. Phys. Chem. Solids, **7**, 52 (1958).
Обменные члены в формализме эффективной массы.
3890. Phillips J. C., Phys. Rev., **113**, 147 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные спектры и теплоемкость решеток типа алмаза.
3891. Phillips J. C., Phys. Rev. Lett., **3**, 327 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в металлах.
3892. Phillips J. C., Journ. Phys. Chem. Solids, **12**, 208 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое поглощение в германии.
3893. Phillips J. C., Journ. Phys. Chem. Solids, **17**, 162 (1960).
Прямое наблюдение открытых магнитных орбит.
3894. Phillips J. C., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 154. (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс; теория.
3895. Phillips J. C., Phys. Rev., **123**, 420 (1961).
Обобщенная теорема Купмена.
3896. Phillips J. C., Phys. Rev., **133**, A452 (1964). (Гл. 5, § 5.)
Поглощение изоляторов в ультрафиолетовой области. II. Частично ионные кристаллы.
3897. Phillips J. C., Phys. Rev., **136**, A1705 (1964). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Поглощение изоляторов в ультрафиолетовой области. III. Гранцендентрированные кубические щелочногаллоидные кристаллы.
3898. Phillips J. C., Phys. Rev., **136**, A1714 (1964). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Поглощение изоляторов в ультрафиолетовой области. IV. Кристаллы инертных газов.
3899. Phillips J. C., Phys. Rev., **136**, A1721 (1964). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Поглощение изоляторов в ультрафиолетовой области. V. Галогениды цезия.
3900. Phillips J. C., Phys. Rev., **137**, A1835 (1965). (Гл. 11, § 7.)
Дальнейшее подтверждение существования коллективных резонансов в одновалентных металлах.
3901. Phillips J. C. (см. [1262, 1426, 1593, 1604, 1936, 3320]).
3902. Pick R., Sargent G., Phys. Rev., **135**, A1363 (1964).
Метод ортогонализированных плоских волн и полная энергия металла.
3903. Pickard G. L., Simon F. E., Proc. Phys. Soc., **61**, 1 (1948). (Гл. 1, § 4.)
Атомные теплоты палладия, натрия и ртути при низких температурах.

3904. Picus G., Burstein E., Henvis B., Journ. Phys. Chem. Solids, 1, 75 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Спектры примесного поглощения в кремнии. II. Доноры пятой группы.
3905. Picus G., Burstein E., Henvis B., Hass M., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 282 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Исследования полярности полупроводниковых соединений по данным о колебаниях решетки в инфракрасной области.
3906. Picus G. (см. [1459—1464, 3808, 3812]).
3907. Pike E. R., Proc. Phys. Soc., 81, 427 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Вторичное квантование многофермионного оператора общего вида.
3908. Pike E. R., Proc. Phys. Soc., 84, 83 (1964). (Гл. 11, § 7.)
Новое тождество в методе функций Грина в задаче многих тел.
3909. Pike E. R. (см. [1471]).
3910. Пикус Г. Е., ЖТФ, 26, 22, 36 (1956). (Гл. 2, § 4.)
Термо- и гальваномагнитные эффекты в полупроводниках с учетом изменений концентрации носителей. I. Термо- и гальваномагнитные явления в слабых полях. II. Гальваномагнитные эффекты в сильных полях. Теплопроводность электронов и экситонов.
3911. Пикус Г. Е., ЖТФ, 27, 1606 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Рассеяние дырок в германии и кремнии.
3912. Пикус Г. Е., ЖТФ, 28, 2390 (1958).
О связи между различными теориями рассеяния носителей тока в полупроводниках.
3913. Пикус Г. Е., Бир Г. Л., ФТТ, 1, 154 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Влияние деформации на энергетический спектр и электрические свойства дырочного германия и кремния.
3914. Пикус Г. Е., Бир Г. Л., ФТТ, 1, 1642 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Влияние деформации на энергетический спектр дырок в германии и кремнии.
3915. Пикус Г. Е., Бир Г. Л., ФТТ, 1, 1828 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Влияние деформации на электрические свойства дырочного германия и кремния.
3916. Пикус Г. Е., Бир Г. Л., Phys. Rev. Lett., 6, 103 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный и парамагнитный резонанс в напряженных кристаллах.
3917. Пикус Г. Е., Бир Г. Л., ФТТ, 3, 1001 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный и парамагнитный резонанс в деформированных кристаллах.
3918. Пикус Г. Е., ФТТ, 3, 2808 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Энергетический спектр в кристаллах с решеткой теллура при учете спин-орбитального взаимодействия.
3919. Пикус Г. Е., Бир Г. Л., ФТТ, 4, 2090 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Эффекты пьезосопротивления в кристаллах типа PbS—PbTe.
3920. Пикус Г. Е. (см. [1226—1229, 3746]).
3921. Piller H., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 425 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффективная масса электрона в GaSb, определенная по данным об эффекте Фарадея.
3922. Pincherle L., Radcliffe J. M., Adv. Phys., 5, 271 (1956).
Полупроводниковые интерметаллические соединения.
3923. Pincherle L., Lee P. M., Proc. Phys. Soc., 80, 305 (1962).
О собственных функциях импульса для периодической проблемы.
3924. Pincherle L., Parasconstantopoulos D., Proc. Phys. Soc., 83, 327 (1964).
О собственных функциях импульса для периодической проблемы.
3925. Pincherle L. (см. [3239]).

3926. Pipes D., Bohm D., Phys. Rev., **85**, 338 (1952). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Коллективное описание электронных взаимодействий. II. Коллективный и индивидуальный аспекты взаимодействия частиц.
3927. Pipes D., Phys. Rev., **92**, 626 (1953). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Коллективное описание электронных взаимодействий. IV. Взаимодействие электронов в металлах.
3928. Pipes D., Proc. 10th Solvay Conf. Brussels, 1954, p. 9. (Гл. 11, § 7.)
Коллективное описание взаимодействия электронов в металлах.
3929. Pipes D., Solid State Phys., **1**, 367 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Взаимодействие электронов в металлах.
3930. Pipes D., Rev. Mod. Phys., **28**, 184 (1956). (Гл. 5, § 3; гл. 11, § 7.)
Коллективные энергетические потери в твердых телах.
3931. Pipes D., Canad. Jour. Phys., **34**, 1379 (1956). (Гл. 11, § 7.)
Взаимодействие электронов в твердых телах.
3932. Pipes D., Nuovo Cimento, Suppl., **7**, 329 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Электроны и плазмы.
3933. Pipes D., Physica, **26** (Suppl.), S103 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Плазменные колебания в электронных газах.
3934. Pipes D., Schrieffer J. R., Phys. Rev., **124**, 1387 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Коллективное поведение в плазмах твердого тела.
3935. Pipes D., IRE Trans. Microwave Theory Techn., **MTT-9**, 89 (1961) (Гл. 11, § 7.)
Когерентное возбуждение плазменных колебаний в твердых телах.
3936. Pipes D. (см. [1280, 1281, 1283, 1284, 2622, 3750, 3751, 3753, 3754, 3756]).
3937. Piper W. W., Johnson P. D., Marple D. T. F., Jour. Phys. Chem. Solids, **8**, 457 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Температурная зависимость оптической ширины запрещенной зоны в ZnS.
3938. Pirrard A. B., Proc. Roy. Soc., **A191**, 370, 385, 399 (1947). (Гл. 5, § 1.)
Поверхностный импеданс сверхпроводников и нормальных металлов на высоких частотах. I. Сопротивление сверхпроводящих олова и ртути при 1200 Мгц. II. Аномальный скин-эффект в нормальных металлах. III. Соотношение между импедансом и глубиной проникновения поля в сверхпроводник.
3939. Pirrard A. B., Physica, **15**, 45 (1949). (Гл. 5, § 1.)
Высокочастотное скин-сопротивление металлов при низких температурах.
3940. Pirrard A. B., Proc. Roy. Soc., **A203**, 98, 195 (1950). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 1.)
Поверхностный импеданс сверхпроводников и нормальных металлов на высоких частотах. IV. Импеданс монокристаллов нормального и сверхпроводящего олова при 9400 Мгц. V. Анализ экспериментальных результатов для сверхпроводящего олова.
3941. Pirrard A. B., Proc. Phys. Soc., **A65**, 955 (1952). (Гл. 3, § 11.)
Средняя длина свободного пробега электронов проводимости в висмуте.
3942. Pirrard A. B., Proc. Roy. Soc., **A224**, 273 (1954). (Гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект в анизотропных металлах.
3943. Pirrard A. B., Proc. 10th Solvay Conf., Brussels, 1954.
Экспериментальные методы определения формы поверхности Ферми.
3944. Pirrard A. B., Adv. Electr. Electron. Phys., **6**, 1 (1954).
Металлическая проводимость при высоких частотах и низких температурах.

3945. Pippard A. V., *Phil. Mag.*, **46**, 1104 (1955). (Гл. 3, § 9)
Затухание ультразвука в металлах.
3946. Pippard A. V., *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **250**, 325 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Экспериментальное определение поверхности Ферми в меди.
3947. Pippard A. V., *Phil. Mag.*, **2**, 1147 (1957) (Гл. 3, § 9)
Предлагаемый способ определения поверхности Ферми с помощью магнетоакустического резонанса.
3948. Pippard A. V., *Proc. Roy. Soc.*, **A257**, 165 (1960). (Гл. 3, § 9)
Теория затухания ультразвука в металлах и магнетоакустических осцилляций.
3949. Pippard A. V., *Rep. Progr. Phys.*, **23**, 176 (1960).
Экспериментальное исследование электронной структуры металлов.
3950. Pippard A. V., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 224. (Гл. 3, § 9)
Теория затухания ультразвука в металлах.
3951. Pippard A. V., *Proc. Roy. Soc.*, **A270**, 1 (1962).
Квантование связанных орбит в металлах.
3952. Pippard A. V., *Proc. Roy. Soc.*, **A272**, 192 (1963). (Гл. 3, § 9)
Замечание о предположении Шёнберга касательно эффекта де Газа — ван Альфена.
3953. Pippard A. V., *Brit. Journ. Appl. Phys.*, **14**, 766 (1963).
Металлы в сильных магнитных полях.
3954. Pippard A. V., *Phil. Mag.*, **8**, 161 (1963).
Усиление звука в полупроводниках и металлах.
3955. Pigneppe J., *Helv. Phys. Acta*, **22**, 479 (1949).
О теории диэлектриков и спонтанной поляризации кристаллов по Онзагеру.
3956. Pigneppe J., *Physica*, **15**, 1019 (1949). (Гл. 8, § 5.)
К вопросу о сегнетоэлектрических свойствах кристаллов KN_2PO_4 и KD_2PO_4 .
3957. Pigneppe J., *Physica*, **24**, 73 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Динамика кристаллической решетки, содержащей изотопы.
3958. Plaszek G., van Hove L., *Phys. Rev.*, **93**, 1207 (1954). (Гл. 8, § 1; гл. 11, § 7.)
Динамика кристалла и неупругое рассеяние нейтронов.
3959. Plaskett J. S., *Phil. Mag.*, **45**, 1255 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Автолокализованные электроны в металлах.
3960. Plaskett J. S. (см. [1617]).
3961. Platzman P. M., Buchsbaum S. J., *Phys. Rev.*, **128**, 1004 (1962).
Распространение волн вдоль магнитного поля в тепловой плазме.
3962. Platzman P. M., Buchsbaum S. J., *Phys. Rev.*, **132**, 2 (1963).
Прохождение электромагнитных волн через плазменные слои.
3963. Platzman P. M., Jacobs K. C., *Phys. Rev.*, **134**, A974 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Эффекты ферми-жидкости в циклотронном резонансе.
3964. Поляков Е. П., *ФТТ*, **2**, 2210 (1960).
Рассеяние электронов на акустических колебаниях в гексагональных кристаллах.
3965. Поляков Е. П., *ЖЭТФ*, **38**, 1153 (1960).
Резонансное поглощение высокочастотной звуковой энергии носителями тока полупроводника в магнитном поле.
3966. Полякова А. Л., *ФТТ*, **6**, 65 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Нелинейные эффекты в твердом теле.
3967. Pople J. A., *Phil. Mag.*, **44**, 1276 (1953).
Диэлектрическая поляризация дипольной решетки.

3968. Pople J. A., *Mol. Phys.*, 1, 175 (1958).
Теория ароматических кольцевых токов по методу молекулярных орбит.
3969. Pople J. A., *Journ. Chem. Phys.*, 37, 53, 60 (1962).
Теория диамагнетизма по методу молекулярных орбит. I. Приближенная схема ЛКАФ. II. Расчет констант Паскаля для некоторых нециклических молекул.
3970. Pople J. A., *Journ. Chem. Phys.*, 38, 1276 (1963).
Теория диамагнитной поляризации по методу молекулярных орбит. III. Анизотропные свойства ионов карбонатов и нитратов.
3971. Pople J. A. (см. [1432, 1435, 1436, 1440, 1441, 2636, 3677]).
3972. Попов Ю. М., *ЖЭТФ*, 35, 505 (1958).
О сечениях возможной безызлучательной рекомбинации в полупроводниках.
3973. Порфирьева Н. Н., *ЖЭТФ*, 33, 47 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Связь внутримолекулярных и межмолекулярных колебаний в кристалле.
3974. Порфирьева Н. Н., *ФТТ*, 1, 873 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Электропроводность и эффект Холла в полярном полупроводнике при учете рассеяния носителей тока на оптических и акустических колебаниях решетки и на ионах примеси.
3975. Portis A. M., *Journ. Phys. Chem. Solids*, 8, 326 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Микроволновой эффект Фарадея; измерение тензора проводимости.
3976. Portis A. M. (см. [2834]).
3977. Потапов Л. П., *ФТТ*, 5, 1927 (1963). (Гл. 8, § 1.)
О соотношении между теплоемкостью и тепловым фактором рассеяния рентгеновских лучей.
3978. Потапов Л. П. (см. [1322]).
3979. Potter R. J., Dexter D. L., *Phys. Rev.*, 108, 677 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Сопротивление меди, обусловленное атомами внедрения.
3980. Poulet H., *Compt. Rend.*, 246, 738 (1958). (Гл. 8, § 5.)
О взаимодействии колебаний сложных ионов или молекул в кристаллической среде.
3981. Powell C. J., *Proc. Phys. Soc.*, 76, 593 (1960). (Гл. 5, § 3.)
Происхождение характеристических энергетических потерь в десяти элементах.
3982. Powell C. J., *Plasma Phys.-Accelerators-Thermonucl. Res.*, 2, 57 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Происхождение характеристических энергетических потерь электронов в алюминии и магнии.
3983. Powell R. L., Roder H. M., Hall W. J., *Phys. Rev.*, 115, 314 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Низкотемпературные кинетические свойства меди и ее разбавленных сплавов: чистой меди, отожженной и холодно-тянутой.
3984. Power E. A., Zienau S., *Journ. Franklin Inst.*, 264, 403 (1957). (Приложение 5, § 7.)
О физической интерпретации релятивистской поправки к силам Ван дер Ваальса, найденной Пенфильдом и Затским.
3985. Power E. A., Zienau S., *Nuovo Cimento*, 6, 7 (1957). (Приложение 5, § 7.)
О радиационном вкладе в силы Ван дер Ваальса.
3986. Power E. A. (см. [1034]).
3987. Пожела Ю. К., *ЖТФ*, 26, 277 (1956).
К вопросу об эффекте сильного электрического поля в полупроводниках.

3988. Prange R. E., Kadapoff L. P., Phys. Rev., **134**, A566 (1964).
Теория явлений переноса для электрон-фононных взаимодействий в металлах.
3989. Prange R. E. (см. [2920]).
3990. Prasad S. C., Wooster W. A., Acta Cryst., **8**, 506 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Определение упругих постоянных германия с помощью диффузного рентгеновского отражения.
- 3990а. Prasad S. C., Wooster W. A., Acta Cryst., **8**, 682 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Белое олово.
3991. Pratt G. W., Jr., Phys. Rev., **118**, 462 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Обобщение зонной теории на предмет учета собственно энергетической поправки.
3992. Pratt G. W., Rev. Mod. Phys., **35**, 502 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Обобщенное одночастичное уравнение.
3993. Pratt G. W. (см. [1627, 4159]).
3994. Prener J. S., Williams F. E., Phys. Rev., **101**, 1427 (1956).
Связанные донорно-акцепторные центры свечения.
3995. Prener J. S., Williams F. E., Jour. Phys. Rad., **17**, 667 (1956).
Теория центров свечения типа донорно-акцепторных пар.
3996. Prener J. S., Williams F. E., Jour. Phys. Chem. Solids, **8**, 484 (1959).
Некоторые характеристики полупроводниковых соединений с большой шириной запрещенной зоны.
3997. Pretzel F. E., Rupert G. N., Mader C. L., Storms E. K., Gritton G. V., Rushing C. C., Jour. Phys. Chem. Solids, **16**, 10 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Свойства гидрида лития. I. Монокристаллы.
3998. Pretzel F. E., Rushing C. C., Jour. Phys. Chem. Solids, **17**, 232 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Свойства гидрида лития. II. Оптическое поглощение центрами окраски.
3999. Price P. J., Proc. Phys. Soc., **B69**, 851 (1956).
Аномальные значения числа Лоренца в смешанных полупроводниках.
4000. Price P. J., Phys. Rev., **102**, 1245 (1956).
Теория явлений переноса в полупроводниках; коэффициент Нернста и его связь с термо-э. д. с.
4001. Price P. J., Phys. Rev., **104**, 1223 (1956).
Теория явлений переноса в полупроводниках; термоэлектрические эффекты.
4002. Price P. J., IBM Jour. Res. Developm., **1**, 147 (1957).
Число Лоренца.
4003. Price P. J., IBM Jour. Res. Developm., **1**, 239 (1957). (Гл. 2, § 4.)
Линейный эффект Холла.
4004. Price P. J., IBM Jour. Res. Developm., **2**, 123 (1958).
О статистической механике примесной проводимости в полупроводниках.
4005. Price P. J., IBM Jour. Res. Developm., **2**, 200 (1958).
Физическая интерпретация средней длины свободного пробега и интегральный метод.
4006. Price P. J., Jour. Phys. Chem. Solids, **8**, 136 (1959).
К теории проводимости в сильном поле.
4007. Price P. J., IBM Jour. Res. Developm., **4**, 152 (1960).
Анизотропная проводимость в твердых телах вблизи поверхностей.

4008. Price P. J., Hartman R. L., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 567 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Междолинное рассеяние на донорных ионах в германии.
4009. Price W. C., Fraser R. D. B., Robinson T. S., Longuet-Higgins H. C., Discussions Faraday Soc., № 9, 1950, p. 131. (Гл. 5, § 5.)
Спектры инфракрасного поглощения соединений бора с азотом.
4010. Priestley M. G., Phil. Mag., **5**, 111 (1960). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление меди, серебра и золота.
4011. Priestley M. G., Phil. Mag., **7**, 1205 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в алюминии.
4012. Priestley M. G., Phys. Rev., **131**, 617 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Экспериментальное и теоретическое изучение магнитного пробоя в магнии.
4013. Priestley M. G., Proc. Roy. Soc., **A276**, 258 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Экспериментальное изучение поверхности Ферми в магнии.
4014. Priestley M. G. (см. [2294]).
4015. Prince E., Wooster W. A., Acta Cryst., **6**, 450 (1953). (Гл. 8, § 1.)
Определение упругих постоянных кристалла по данным о диффузном отражении рентгеновских лучей. III. Алмаз.
4016. Prohofskey E. W., Krumhansl J. A., Phys. Rev., **133**, A1403 (1964).
Распространение второго звука в твердых диэлектриках.
4017. Prohofskey E. W., Phys. Rev., **134**, A1302 (1964).
Вынужденное испускание фононов сверхзвуковыми электронами и коллективные фононные волны.
4018. Prosser V., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 993. (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура селена по данным об оптических и фотоэлектрических свойствах в области видимого спектра.
4019. Pulvari C. F., Kuebler W., Journ. Appl. Phys., **29**, 1315 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Феноменологическая теория обращения поляризации в монокристаллах BaTiO_3 .
4020. Pyle I. C., Proc. Camb. Phil. Soc., **53**, 508 (1957).
Влияние свободных электронов на решеточную теплопроводность (эффект второго порядка).
4021. Quinn J. J., Ferrell R. A., Phys. Rev., **112**, 812 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Метод собственной энергии в задаче о корреляции в вырожденном электронном газе.
4022. Quinn J. J., Ferrell R. A., Plasma Phys.-Accelerators-Thermonucl. Res., **2**, 18 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Рассмотрение взаимодействия в идеализированной модели металла по методу квазичастиц.
4023. Quinn J. J., Rodriguez S., Phys. Rev., **128**, 2487 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Электродинамические свойства квантовой плазмы в однородном магнитном поле.
4024. Quinn J. J., Phys. Rev., **126**, 1453 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Длина пробега возбужденных электронов в металлах.
4025. Quinn J. J., Rodriguez S., Phys. Rev., **128**, 2494 (1962). (Гл. 3, § 9.)
Квантовые эффекты в затухании ультразвука в металлах в магнитном поле.
4026. Quinn J. J., Rodriguez S., Phys. Rev. Lett., **9**, 145 (1962).
Зависимость скорости звука в металлах от магнитного поля.

4027. Quipp J. J., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 933 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Диаманитная восприимчивость квантовой плазмы.
4028. Quipp J. J., *Phys. Rev.*, **135**, A181 (1964).
Тензор проводимости анизотропной квантовой плазмы в однородном магнитном поле.
4029. Quipp J. J., *Phys. Rev.*, **137**, A889 (1965). (Гл. 3, § 9.)
Теория гигантских квантовых осцилляций затухания ультразвука в продольном магнитном поле.
4030. Quipp J. J., Rodriguez S., *Phys. Rev.*, **137**, A1400 (1965). (Гл. 3, § 8.)
Определение циклотронной эффективной массы для неэкстремальных орбит в металлах.
4031. Quipp J. J. (см. [2038, 3175, 4671]).
4032. Работников Ю. Л., *ФТТ*, **2**, 2095 (1960).
Изучение колебаний решетки теллура методами теории групп.
4033. Работников Ю. Л. (см. [993]).
4034. Radkowsky A., *Phys. Rev.*, **73**, 749 (1948).
Температурная зависимость энергетических уровней электронов в твердых телах.
4035. Raimes S., *Rep. Progr. Phys.*, **20**, 1 (1957). (Гл. 11, § 3 и 7.)
Теория плазменных колебаний в металлах.
4036. Raimes S. (см. [1642, 1643]).
4037. Rajagopal A. K., Srinivisan R., *Zs. Phys.*, **158**, 471 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки и теплоемкость цинковой обманки.
4038. Rajagopal A. K., Srinivisan R., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **23**, 633 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки кубических структур типа перовскита, в частности SrTiO_3 .
4039. Ramachandran G. N., Wooster W. A., *Acta Cryst.*, **4**, 335, 431 (1951). (Гл. 8, § 1.)
Определение упругих постоянных кристаллов по диффузному отражению рентгеновских лучей. I, II.
4040. Ramap C. V., *Proc. Indian Acad. Sci.*, **A42**, 163 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Природа теплового движения в кристаллах.
4041. Rao G. N., Zebouni N. H., Grenier C. G., Reynolds J. M., *Phys. Rev.*, **133**, A141 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в сурьме при температурах жидкого гелия.
4042. Рашба Э. И., *ЖТФ*, **28**, 1415 (1956).
Диффузия носителей тока в полупроводнике при наличии внешнего электрического поля.
4043. Рашба Э. И., *Оптика и спектроскопия*, **2**, 568 (1957).
Теория примесного поглощения света в молекулярных кристаллах.
4044. Рашба Э. И., *ФТТ*, **2**, 1224 (1960). (Гл. 3, § 8.)
Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинированный резонансы в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли.
4045. Рашба Э. И., *Semicond. Phys. Conf.*, Prague, 1960, New York, 1961, p. 45.
Полупроводники с петлей экстремумов.
4046. Рашба Э. И., Бойко И. И., *ФТТ*, **3**, 1277 (1961).
Свойства полупроводников с петлей экстремумов. III. Поведение в магнитном поле, параллельном плоскости петли.
4047. Рашба Э. И., Шеква В. И., *ФТТ*, **3**, 1863 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Комбинированный резонанс в электронном InSb .

4048. Рашба Э. И., Шека В. И., ФТТ, 3, 2369 (1961).
Свойства полупроводников с петлей экстремумов. IV. Угловая зависимость комбинированного резонанса в сильном магнитном поле.
4049. Рашба Э. И. (см. [1290]).
4050. Rau R. R., Caspari M. E., Phys. Rev., 100, 632 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Фарадея в германии при комнатной температуре.
4051. Rauch C. J., Heer C. V., Phys. Rev., 105, 914 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Оптические силы осцилляторов некоторых F -зон в аддитивно окрашенных галогенидах щелочных металлов.
4052. Rauch C. J., Stickler J. J., Zeiger H. J., Heller G. S., Phys. Rev. Lett., 4, 64 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в кремнии в миллиметровом диапазоне.
4053. Rauch C. J., Phys. Rev. Lett., 7, 83 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Опыты по циклотронному резонансу в алмазе в миллиметровом диапазоне.
4054. Rauch C. J., Semicond. Conf. Exeter, 1962, London, 1962, p. 276. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в алмазе в миллиметровом диапазоне.
4055. Rauch C. J. (см. [4936, 4937]).
4056. Равич Ю. И., ФТТ, 2, 2366 (1960).
К теории фотомагнитных эффектов в полупроводниках со сложными энергетическими зонами.
4057. Раупе J. A., Australian Journ. Phys., 9, 189 (1956). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость меди ниже $4,2^\circ \text{K}$.
4058. Раупе J. A., Phys. Rev., 108, 22 (1957). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость α -латуной ниже $4,2^\circ \text{K}$.
4059. Раупе J. A., Phys. Rev., 108, 649 (1957). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость Cu_3Au ниже $4,2^\circ \text{K}$.
4060. Раупе J. A., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 268 (1958). (Гл. 1, § 4.)
Теплоемкость разбавленных магний-алюминиевых сплавов ниже $4,2^\circ \text{K}$.
4061. Раупе J. A., Phys. Rev. Lett., 3, 512 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Температурная зависимость коэффициента поглощения меди в близкой инфракрасной области.
4062. Раупе J. A., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 266 (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства металлов.
4063. Раупе J. A., Phys. Rev., 121, 456 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура сплавов благородных металлов; оптическое поглощение в сплавах Cu-Ge при $4,2^\circ \text{K}$.
4064. Раупе J. A., Chandrasekhar B. S., Phys. Rev., 125, 1952 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми In по данным магнетоакустических измерений.
4065. Раупе J. A., Sell H., Phys. Rev. Lett., 8, 199 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетоакустические осцилляции в вольфраме.
4066. Раупе J. A., Phys. Lett., 2, 128 (1962); 3, 256 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетоакустические осцилляции в таллии.
4067. Раупе J. A., Phys. Rev., 131, 653 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми таллия по результатам магнетоакустических измерений.
4068. Раупе J. A., Phys. Rev., 133, A1104 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Поверхность Ферми вольфрама по результатам магнетоакустических измерений.

4069. Раупе J. A. (см. [1224, 1348, 1349, 1350, 1526]).
4070. Ребане Т. К., ЖЭТФ, **31**, 353 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Применение сетчатой модели к полупроводникам типа сульфида свинца.
4071. Redei L. B., Proc. Roy. Soc., **A270**, 373 (1962). (Гл. 11, § 1.)
Электронные свойства тетраэдрических интерметаллических соединений. II. Зона проводимости в алмазе. III. Многоэлектронная модель для расчета электронных возбужденных состояний в соединениях типа $A^{IV}B^{IV}$ и $A^{III}B^{IV}$ со структурой цинковой обманки.
4072. Redei L. B. (см. [1649]).
4073. Rediker R. H., Calawa A. R., Journ. Appl. Phys., **32** (Suppl.), 2189 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Магнетотуннельный эффект в теллуриде свинца.
4074. Redin R. D., Morris R. G., Danielson G. C., Phys. Rev., **109**, 1916 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Полупроводниковые свойства монокристаллов Mg_2Ge .
4075. Redin R. D. (см. [3635]).
4076. Reed W. A., Marcus J. A., Phys. Rev., **126**, 1298 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Топология поверхности Ферми Ga.
4077. Reed W. A., Brenner G. F., Phys. Rev., **130**, 565 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Топология поверхности Ферми Zn по данным гальваномагнитных измерений.
4078. Reed W. A., Marcus J. A., Phys. Rev., **130**, 957 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Гальваномагнитные коэффициенты Ga в слабых полях.
4079. Reed W. A., Fawcett E., Phys. Rev., **136**, A422 (1964). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление железа с объемноцентрированной кубической решеткой в сильных полях.
4080. Reed W. A. (см. [2025, 2028, 2029]).
4081. Reitz J. R., Journ. Chem. Phys., **22**, 595 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Обменная энергия электронов в металлах и ионных кристаллах.
4082. Reitz J. R., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 53 (1964).
Магнитный пробой в металлах.
4083. Reitz J. R. (см. [1982, 2726]).
4084. Reneker D. H., Phys. Rev. Lett., **1**, 440 (1958). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Новые осцилляции поглощения ультразвуковых волн в висмуте в магнитном поле.
4085. Reneker D. H., Phys. Rev., **115**, 303 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Затухание ультразвука в висмуте при низких температурах.
4086. Renneke D. R., Lynch D. W., Phys. Rev., **138**, A530 (1965). (Гл. 8, § 6.)
Колебания решетки и диэлектрическая дисперсия в монокристалле Cu_2O_3 в инфракрасной области.
4087. Reuter G. E. H., Sondheimer E. H., Nature, **161**, 394 (1948). (Гл. 5, § 1.)
Теория аномального скин-эффекта в металлах.
4088. Reuter G. E. H., Sondheimer E. H., Proc. Roy. Soc., **A195**, 336 (1948). (Гл. 5, § 1.)
Теория аномального скин-эффекта в металлах.
4089. Reynolds J. M., Hemstreet H. W., Leinhardt T. E., Triantos D. D., Phys. Rev., **96**, 1203 (1954). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в висмуте при низких температурах.
4090. Reynolds J. M. (см. [4041]).

4091. Rhodes P., Proc. Roy. Soc., **A202**, 466 (1950).
Интегральное уравнение Блоха и электропроводность.
4092. Rhodes R. G., Acta Cryst., **2**, 417 (1949). (Гл. 8, § 5.)
Структура BaTiO₃ при низких температурах.
4093. Rickauzen G., Proc. Roy. Soc., **A241**, 480 (1957).
К теории теплового захвата электронов в полупроводниках.
(См. перевод в сборнике «Рекомбинация носителей тока в полупроводниках», ИЛ, 1959, стр. 69.)
4094. Rigaux C., Thuillier J. M., Compt. Rend., **242**, 2710 (1956). (Гл. 3, § 10.)
Отрицательное магнетосопротивление в полупроводниках.
4095. Rigaux C., Compt. Rend., **253**, 81 (1961); Jour. Phys. Chem. Solids, **23**, 805 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Изучение зонной структуры теллура с помощью явлений переноса.
4096. Rigaux C. (см. [930, 1489]).
4097. Ritchie R. H., Phys. Rev., **106**, 874 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Плазменные энергетические потери быстрых электронов в тонких пленках.
4098. Ritchie R. H., Phys. Rev., **114**, 644 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Взаимодействие заряженных частиц с вырожденным электронным газом Ферми — Дирака.
4099. Rittner E. S., Hutner R. A., du Pre F. K., Jour. Chem. Phys., **17**, 198 (1949).
К вопросу о работе поляризации ионных кристаллов типа NaCl. I. Поляризация вокруг одиночного заряда в жесткой решетке.
4100. Rittner E. S., Jour. Chem. Phys., **19**, 1030 (1951). (Гл. 10, § 4.)
Энергия связи и дипольный момент молекул галогенидов щелочных металлов.
4101. Rittner E. S., Phys. Rev., **101**, 1291 (1956).
Легкие дырки в полупроводниках с вырожденной валентной зоной.
4102. Rittner E. S. (см. [1891, 2640, 2641]).
4103. Robert M., Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist., **78**, 535 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Дисперсия продольных волн, распространяющихся вдоль оси третьего порядка в алюминии.
4104. Roberts V. W., Phys. Rev., **119**, 1889 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Магнетоакустические осцилляции и поверхность Ферми в алюминии.
4105. Roberts V. W., Phys. Rev. Lett., **6**, 453 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Ультразвуковой циклотронный резонанс в галлии.
4106. Roberts C. S., Buchsbaum S. J., Phys. Rev., **135**, A381 (1964).
Движение заряженной частицы в постоянном магнитном поле и поперечной электромагнитной волны, распространяющейся вдоль поля.
4107. Roberts L. D., Becker R. L., Obershain F. E., Thomson J. O., Phys. Rev., **137**, A895 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Корреляция измеренного сдвига Мессбауэра с остаточным электрическим сопротивлением сплавов Au¹⁹⁷.
4108. Roberts L. M., Proc. Phys. Soc., **B70**, 738 (1957). (Гл. 1, § 4.)
Атомные теплоты кальция, стронция и бария между 1,5 и 20° К.
4109. Roberts L. M., Proc. Phys. Soc., **B70**, 744 (1957). (Гл. 1, § 4.)
Атомные теплоты лития, натрия и калия между 1,5 и 20° К.
4110. Roberts S., Phys. Rev., **76**, 1215 (1949). (Гл. 5, § 5.)
Диэлектрические проницаемости и поляризуемости ионов в монокристаллах титаната бария.
4111. Roberts S., Phys. Rev., **81**, 161 (1951). (Гл. 5, § 5.)
Исправленные диэлектрические параметры ионов щелочных металлов и галлоидов.

4112. Roberts S., Phys. Rev., 100, 1667 (1955). (Гл. 5, § 5.)
Интерпретация оптических свойств металлических поверхностей.
4113. Roberts S., Phys. Rev., 114, 104 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства никеля и вольфрама и их интерпретация на основании формулы Друде.
4114. Roberts S., Phys. Rev., 118, 1509 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства Cu.
4115. Roberts V., Quarrington J. E., Journ. Electron., 1, 152 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Точные измерения поглощения в антимониде индия и антимониде галлия.
4116. Roberts V. (см. [3407—3412]).
4117. Robins D. A., Phil. Mag., 3, 315 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Магнитная восприимчивость и электрическое сопротивление силицидов переходных металлов.
4118. Robins J. L., Best P. E., Proc. Phys. Soc., 79, 110 (1962). (Гл. 5, § 3.)
Спектры характеристических энергетических потерь электронов в некоторых щелочных и щелочноземельных металлах.
4119. Robins J. L., Proc. Phys. Soc., 79, 119 (1962). (Гл. 5, § 3.)
Спектры характеристических энергетических потерь электронов в ряде твердых элементов.
4120. Robinson J. E., Bassani F., Кнох В. S., Schrieffer J. R., Phys. Rev. Lett., 9, 215 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Поправка к обменному потенциалу Слэтера, обусловленная экранированием.
4121. Robinson J. E., Rodriguez S., Phys. Rev., 135, A779 (1964).
Рассеяние на ионизированных примесях в вырожденных многодолинных полупроводниках.
4122. Robinson J. E. (см. [1137]).
4123. Rocher Y. A., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 1621 (1962).
Роль виртуальных связанных уравнений в редкоземельных металлах.
4124. Rodberg L. S., Ann. Phys., 2, 199 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Задача многих тел и приближение Бракнера.
4125. Rodot M., Compt. Rend., 243, 129 (1956).
Теория поперечных магнетотермоэлектрических эффектов в полупроводниках.
4126. Rodot M., Compt. Rend., 245, 1051 (1957). (Гл. 3, § 11.)
О рассеянии электронов на оптических колебаниях в антимониде индия.
4127. Rodot M., Compt. Rend., 250, 1447 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и механизмы рассеяния в монокристаллах теллурида и селенида ртути.
4128. Rodriguez S., Phys. Rev., 112, 80 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Зависимость затухания ультразвука в металлах от магнитного поля при низких температурах.
4129. Rodriguez S., Phys. Rev., 112, 1616 (1958). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонанса в металлах.
4130. Rodriguez S., Phys. Rev., 132, 535 (1963).
Осцилляции скорости звука в металлах в магнитном поле.
4131. Rodriguez S. (см. [3175, 3788, 4023, 4121]).
4132. Rollins B. V., Russell J. P., Proc. Phys. Soc., 81, 571 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Примесная проводимость в германии, легированном медью.

4133. Rollins F. R., Jr., Taylor L. H., Todd P. H., Jr., Phys. Rev., **136**, A597 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Исследование трехфононного взаимодействия с помощью ультразвука. II. Экспериментальные результаты.
4134. Rollins F. R. (см. [4609]).
4135. Ron A., Tzoar N., Phys. Rev., **133**, A1378 (1964).
Зависящее от частоты время релаксации электрон-фононных систем. II. Эффекты, обусловленные конечностью времени жизни фонона.
4136. Ron A., Phys. Rev., **134**, A70 (1964).
Динамика вырожденного электронного газа в магнитном поле.
4137. Rose D. J., Phys. Rev., **105**, 413 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Микроплазмы в кремнии.
4138. Rose F. W. G., Sandiford D. J., Proc. Phys. Soc., **B68**, 894 (1955).
Простой способ определения времени жизни дырок в полупроводнике *n*-типа с акцепторными ловушками.
4139. Rose F. W. G., Billig E., Parrett J. E., Journ. Electron. Control, **3**, 481 (1957).
Простой вывод формулы для термо-э. д. с. невырожденного полупроводника.
4140. Rose F. W. G., Proc. Phys. Soc., **71**, 699 (1958).
О законе действующих масс в вырожденных полупроводниках.
4141. Rose-Innes A. C., Proc. Phys. Soc., **72**, 514 (1958). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Наблюдение эффектов механического напряжения в германии и кремнии с помощью циклотронного резонанса.
4142. Rose-Innes A. C. (см. [1388]).
4143. Rosenblum B., Duncan R. C., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 606. (Гл. 3, § 8.)
Некоторые квантовые аспекты циклотронного резонанса частиц с отрицательными массами.
4144. Rosenblum B. (см. [1888, 2892, 3572]).
4145. Rosenstock H. B., Newell G. F., Journ. Chem. Phys., **21**, 1607 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Колебания простой кубической решетки. I.
4146. Rosenstock H. B., Rosenstock H. M., Journ. Chem. Phys., **21**, 1608 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Колебания простой кубической решетки. II.
4147. Rosenstock H. B., Journ. Chem. Phys., **21**, 2064 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки графита.
4148. Rosenstock H. B., Journ. Chem. Phys., **23**, 2415 (1955). (Гл. 5, § 5.)
Об оптических свойствах твердых тел.
4149. Rosenstock H. B., Journ. Chem. Phys., **27**, 1194 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Об оптических свойствах твердых тел. II.
4150. Rosenstock H. B., Journ. Phys. Chem. Solids, **2**, 44 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Критические точки в трехмерном случае.
4151. Rosenstock H. B., Phys. Rev., **111**, 755 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Колебания одномерной ионной решетки.
4152. Rosenstock H. B., Journ. Phys. Chem. Solids, **4**, 201 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Инфракрасное поглощение в решетках типа хлористого натрия.
4153. Rosenstock H. B., Click C. C., Phys. Rev., **119**, 1198 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Колебательные моды вблизи примесей.
4154. Rosenstock H. B., Journ. Phys. Chem. Solids, **15**, 50 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Инфракрасное поглощение в одномерных ионных решетках.

4155. Rosenstock H. B., Phys. Rev., **121**, 416 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Природа нормальных колебаний ионных кристаллов.
4156. Rosenstock H. B. (см. [1332, 3888]).
4157. Roth H., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 525 (1959). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Измерение гальваномагнитных эффектов в чистом теллуре.
4158. Roth H. (см. [1204, 1205]).
4159. Roth L. M., Pratt G. M., Jr., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 47, 50 (1959). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Многоэлектронная трактовка диэлектрического экранирования в случае примесных состояний и экситонов в полупроводниках.
4160. Roth L. M., Lax B., Zwergling S., Phys. Rev., **114**, 90 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Теория магнетооптического поглощения в полупроводниках.
4161. Roth L. M., Lax B., Phys. Rev. Lett., **3**, 217 (1959). (Гл. 3, § 11.)
 g -фактор электронов в германии.
4162. Roth L. M., Phys. Rev., **118**, 1534 (1960). (Гл. 3, § 11.)
 g -фактор и донорная спин-решеточная релаксация электронов в германии и кремнии.
4163. Roth L. M., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 433 (1962).
Теория блоховских электронов в магнитном поле.
4164. Roth L. M., Phys. Rev., **133**, A542 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Теория эффекта Фарадея в твердых телах.
4165. Roth L. M. (см. [1016, 2296, 2301, 2926, 3193, 3196, 4971—4974, 4976]).
4166. Ruffa A. R., Phys. Rev., **130**, 1412 (1963). (Гл. 5, § 5.)
Теория электронных поляризуемостей ионов в кристаллах; приложения к щелочногалогидным кристаллам.
4167. Ruffa A. R., Phys. Rev., **133**, A1418 (1964).
Теория электронных восприимчивостей стехиометрического рутила (TiO_2).
4168. Ruthemann G., Ann. Phys., **2**, 113 (1948). (Гл. 5, § 3.)
Дискретные энергетические потери электронов средней энергии при прохождении через тонкие пленки.
4169. Рябинин М. Н., ФТТ, **3**, 1310 (1961). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Продольное магнетосопротивление полупроводников типа n -германия в квантовом пределе.
4170. Ryder E. J., Shockley W., Phys. Rev., **81**, 139 (1951).
Подвижности электронов в сильных электрических полях.
4171. Ryder E. J. (см. [3391]).
4172. Saenz A. W., O'Rourke R. C., Rev. Mod. Phys., **27**, 381 (1955).
Число состояний и магнитные свойства электронного газа.
4173. Safford G., Brajovic V., Boutin H., Journ. Phys. Chem. Solids, **24**, 771 (1963). (Гл. 8, § 1.)
Исследование энергетических уровней гидроокисей щелочноземельных элементов с помощью неупругого рассеяния медленных нейтронов.
4174. Sah Chih-Tang, Noyce R. N., Shockley W., Proc. Inst. Rad. Eng., **45**, 1228 (1957).
Генерация и рекомбинация носителей в $p-n$ -переходах и характеристики $p-n$ -перехода.
4175. Sah Chih-Tang, Shockley W., Phys. Rev., **109**, 1103 (1958).
Статистика рекомбинации электронов и дырок в полупроводниках с многозарядными центрами.
4176. Sah P., Proc. Phys. Soc., **79**, 1082 (1962).
Применение метода присоединенных плоских волн к модели жидкости.

4177. Saito Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **17**, 716 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в InBi.
4178. Saito Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 452 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в сурьме.
4179. Saito Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 1845 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Спиновое расщепление уровней Ландау в висмуте, наблюдаемое с помощью эффекта де Гааза — ван Альфена.
4180. Saito Y., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 1319 (1964). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в сурьме.
4181. Saito Y. (см. [2170]).
4182. Sakamoto Y., Journ. Chem. Phys., **28**, 164 (1958). (Гл. 9, § 3; гл. 10, § 4.)
Постоянные Маделунга для простых кристаллов, выраженные через борновские основные потенциалы с пятнадцатью десятичными знаками.
4183. Saksena B. D., Viswanathan S., Proc. Phys. Soc., **B69**, 129 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Основная частота колебаний решетки MgO.
4184. Salkovitz E. I., Schindler A. I., Kammer E. W., Phys. Rev., **107**, 1549 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Применение теории термо-э. д. с. Фриделя к разбавленным сплавам магния.
4185. Salter L., Proc. Roy. Soc., **A233**, 418 (1955). (Гл. 8, § 5.)
О термодинамике кристаллических решеток.
4186. Salter L. S., Adv. Phys., **14**, 1 (1965).
Зависимость рассеивающих свойств кристаллов от температуры.
4187. Самойлович А. Г., Коренблит Л. Л., УФН, **57**, 577 (1955).
Вырождение электронного газа в полупроводниках.
4188. Самойлович А. Г., Клингер М. И., ЖТФ, **25**, 2050 (1955).
К теории полупроводников с примесной зоной.
4189. Самойлович А. Г., Кондратенко В. М., ЖЭТФ, **31**, 596 (1956).
К теории атомных полупроводников.
4190. Самойлович А. Г., Товстюк К. Д., ЖТФ, **27**, 1753 (1957).
Энергетический спектр носителей тока в полупроводниках типа германия.
4191. Самойлович А. Г., Коренблит Л. Л., ЖТФ, **27**, 2673 (1957).
Квантовая теория кинетических явлений в полупроводниках.
4192. Самойлович А. Г., Клингер М. И., Ницович В. М., ЖТФ, **27**, 2784 (1957).
О корреляции между электронами в узких примесных зонах полупроводников.
4193. Самойлович А. Г., Кондратенко В. М., Укр. физич. журн., **3**, 41 (1958).
К теории атомных полупроводников. I. Вывод гамильтониана атомного полупроводника в полярной модели кристаллов.
4194. Самойлович А. Г., Королюк С. Л., ФТТ, **1**, 1592 (1959).
К теории элементарных возбуждений в атомных полупроводниках.
4195. Самойлович А. Г., Ницович М. В., ФТТ, **2**, 341 (1960). (Гл. 3, § 11.)
К вопросу о магнитной восприимчивости металлического лития.
4196. Самойлович А. Г., Искра В. Д., ФТТ, **2**, 2827 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Влияние анизотропии кристалла на тепловые колебания атомов в Ge и Si.
4197. Самойлович А. Г., Коренблит И. Я., Даховский И. В., Искра В. Д., ФТТ, **3**, 2939 (1961).
Решение кинетического уравнения при анизотропном рассеянии электронов.

4198. Самойлович А. Г., Коренблит И. Я., Даховский И. В., Искра В. Д., ФТТ, 3, 3285 (1961).
Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях и акустических фононах.
4199. Самохвалов А. А., ФТТ, 3, 3593 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Сверхвысокочастотные диэлектрические свойства группы оксидов 3d-переходных металлов.
4200. Самохвалов А. А., Рустамов А. Г., ФТТ, 5, 1202 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронные и магнитные свойства оксида TiO_2 .
4201. Sandog E., Wooster W. A., Acta Cryst., 12, 332 (1959). (Гл. 8, § 1 и 5.)
Упругие постоянные монокристаллов ванадия.
4202. Санииков Д. Г., ФТТ, 4, 1619 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Электромагнитные и звуковые волны в сегнетоэлектриках.
4203. Sasaki T., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 701 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Оптические постоянные германия в крайнем ультрафиолетовом диапазоне.
4204. Sasaki T. (см. [938]).
4205. Sasaki W., Shibuya M., Journ. Phys. Soc. Japan, 11, 1202 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Экспериментальное доказательство анизотропии горячих электронов в германии n-типа.
4206. Sato H., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 55 (1963).
Влияние распределения фононов на горячие электроны в полупроводниках.
4207. Sato H., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 60 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс горячих электронов в германии n-типа.
4208. Sato H. (см. [4546, 4883, 4962]).
4209. Sato T., Journ. Phys. Soc. Japan, 12, 832 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Замечание о коллективных энергетических потерях в металлах.
4210. Sato T. (см. [4308]).
4211. Satten R. A., Journ. Chem. Phys., 26, 766 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Влияние атомных квадрупольных моментов на показатель преломления.
4212. Satten R. A., Journ. Chem. Phys., 27, 286 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Правила отбора в кристаллическом поле; влияние взаимодействия электронов с колебаниями решетки.
4213. Satten R. A., Journ. Chem. Phys., 29, 658 (1958). (Гл. 8, § 5.)
К теории электронно-колебательного взаимодействия в ионах редкоземельных элементов и ионов группы актинидов в кристаллах. II. Октаэдрические комплексы.
4214. Sauegmann G., Zs. Phys., 163, 435 (1961). (Гл. 11, § 7.)
К рассмотрению задачи многих тел в физике твердого тела.
4215. Sauegmann G., Zs. Phys., 169, 198 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Сведение задачи многих тел в физике твердого тела к исследованию электронной и решеточной подсистем.
4216. Sawada K., Phys. Rev., 106, 372 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Корреляционная энергия электронного газа высокой плотности.
[См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», вып. 1, ИЛ, 47 (1958).]
4217. Sawada K., Вгуетскнер К. А., Fukuda J., Brout R., Phys. Rev., 108, 507 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Корреляционная энергия электронного газа высокой плотности; плазменные колебания.
[См. перевод в сборнике «Проблемы современной физики», вып. 1, ИЛ, 11 (1959).]

4218. Sawada K. (см. [1423, 2166, 3522]).
4219. Sawamoto K., *Journ. Phys. Soc. Jарап*, **18**, 1224 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в CdS.
4220. Sawamoto K., *Journ. Phys. Jарап*, **19**, 318 (1964). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в сульфиде кадмия.
4221. Saxl I., *Czech. Journ. Phys.*, **10**, 650 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория мультипольного излучения в диэлектрике.
4222. Scallop W. W., *Phys. Rev.*, **106**, 718 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Время жизни носителей заряда в кристаллах сульфида свинца.
4223. Scallop W. W., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 423, 442 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Последние достижения в изучении оптических и электронных свойств PbS, PbSe, PbTe и их сплавов.
4224. Schechter D., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **23**, 237 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Теория мелких акцепторных состояний в Si и Ge.
4225. Schey H. M., Schwartz J. L., *Phys. Rev.*, **137**, A709 (1965).
Квантовые поправки к модели Томаса — Ферми.
4226. Schindler A. I., Pugh E. M., *Phys. Rev.*, **89**, 295 (1953). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в медно-никелевых сплавах.
4227. Schindler A. I. (см. [3801, 4184]).
4228. Schirber J. E., *Phys. Rev.*, **131**, 2459 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Определение размеров «горлышек» в поверхностях Ферми четновалентных металлов; приложение к свинцу.
4229. Schmid L. A., *Phys. Rev.*, **92**, 1373 (1953). (Гл. 10, § 4; гл. 11, § 1.)
Расчет энергии связи алмаза.
4230. Schmitt R. W., *Phys. Rev.*, **103**, 83 (1956).
Возможное объяснение низкотемпературного максимума сопротивления разбавленных сплавов переходных металлов в благородных металлах.
4231. Schrieffer J. R., *Semicond. Surface Phys.*, 1957, p. 55.
Подвижность в инверсионных слоях; теория и эксперимент.
4232. Schrieffer J. R. (см. [1113, 1137, 1970, 3934, 4120]).
4233. Schröder K., McKain C. E., *Phys. Rev.*, **135**, A149 (1964). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Холловские измерения на сплавах хром—железо и хром—ванадий при комнатной температуре и при температуре жидкого азота.
4234. Schultz M. L., Morton G. A., *Proc. Inst. Rad. Eng.*, **43**, 1819 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Фотопроводимость в германии и кремнии.
4235. Schulz L. G., *Adv. Phys.*, **6**, 102 (1957). (Гл. 5, § 4 и 5.)
Экспериментальное изучение оптических свойств металлов и связь результатов с теорией свободных электронов по Друде.
4236. Schützer W., *Apais. Acad. Brasil. Cienc.*, **28**, 419 (1956). (Гл. 11, § 7.)
О теории плазмы Вома — Пайкса.
4237. Schweinler H. C., *Phys. Rev.*, **87**, 5 (1952). (Гл. 4, § 4; гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектричество в структуре ильменита.
4238. Schweinler H. C. (см. [1664]).
4239. Sclar N., *Phys. Rev.*, **104**, 1559 (1956).
Рассеяние на нейтральных примесях в полупроводниках.
4240. Scott A. B., Burr L. P., *Phys. Rev.*, **79**, 341 (1950). (Гл. 3, § 11.)
Равновесие между F-центрами и более сложными комплексами в KCl.

4241. Seeger A., Proc. 10th Solvay Congr. Brussels, 1954, p. 329. (Гл. 3, § 11.)
К электронной теории переходных металлов.
4242. Seeger A., Canad. Journ. Phys., 34, 1219 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Об электрическом сопротивлении одновалентных металлов, обусловленном дефектами упаковки.
4243. Seeger A., Canad. Journ. Phys., 34, 1278 (1956).
Вариационный принцип для явлений проводимости в присутствии магнитного поля или асимметричных механизмов рассеяния.
4244. Seeger A., Zs. Phys., 144, 637 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Исследования вакансий в металлах с помощью электронной теории. I. Вакансии в решетках никеля, кобальта и их сплавов.
4245. Seeger A., Gross H., Zs. Phys., 145, 161 (1956).
Исследования вакансий в металлах с помощью электронной теории II. Энергия связи пар вакансий в одновалентных и переходных металлах.
4246. Seeger A., Stehle H., Zs. Phys., 146, 242 (1956).
Исследования вакансий в металлах с помощью электронной теории. IV. Электрическое сопротивление, обусловленное дефектами сдвига.
4247. Seeger A., Dornth H., Pfaff F., Discussions Faraday Soc., 23, 19 (1957).
Механизм низкотемпературной механической релаксации в деформированных кристаллах.
4248. Seeger A., Kröner E., Zs. Naturforsch., 14a, 74 (1959).
Теория рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов на малые углы, обусловленного внутренними напряжениями в твердых телах, в частности напряжениями сдвига.
4249. Seeger A. (см. [1392]).
4250. Seeger K., Zs. Phys., 156, 582 (1959).
Рассеяние горячих электронов на ионах в невырожденных неполярных полупроводниках.
4251. Сеидов Ю. М., Галишев В. С., ЖЭТФ, 30, 695 (1956).
К вопросу об учете взаимодействия состояний двух зон в одноэлектронной схеме.
4252. Seitz F., Phys. Rev., 73, 549 (1948).
О подвижности электронов в чистых неполярных изоляторах.
4253. Seitz F., Phys. Rev., 76, 1376 (1949).
К теории электронного умножения в кристаллах.
4254. Seitz F., Phys. Rev., 79, 372 (1950). (Гл. 3, § 10.)
Замечание к теории сопротивления кубического полупроводника в магнитном поле.
4255. Seitz F., Phys. Rev., 79, 529 (1950). (Гл. 3, § 11.)
О природе V-центров в галогенидах щелочных металлов.
4256. Seitz F., Phys. Rev., 80, 239 (1950). (Гл. 3, § 11.)
Влияние пластического течения на электрические и фотографические свойства щелочногаллоидных кристаллов.
4257. Seitz F., Phys. Rev., 83, 134 (1951). (Гл. 3, § 11.)
Центры окраски в аддитивно окрашенных щелочногаллоидных кристаллах, содержащих ионы щелочноземельных элементов.
4258. Seitz F. (см. [1626, 2139, 3483, 865]).
4259. Seiwatz R., Green M., Journ. Appl. Phys., 29, 1034 (1958).
Расчеты пространственного заряда для полупроводников.
4260. Sekido K., Fukai M., Kawamura H., Journ. Phys. Soc. Jap., 19, 1579 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Уширение линии циклотронного резонанса, обусловленное рассеянием на ионизированных примесях в германии.

4261. Sekido K. (см. [2163, 2832]).
4262. Семенов Л. П., ФТТ, 4, 780 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Колебательный спектр графита.
4263. Sepko M. E., Phys. Rev., 121, 1599 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Модельная теория перехода «порядок — беспорядок» для сегнето-электрического эффекта в дигидрофосфатах.
4264. Sewall G. L., Proc. Phys. Soc., 77, 136 (1961).
Диамagnetизм многофермионных систем.
4265. Sewall G. L. (см. [2147]).
4266. Шабанский В. П., Физ. мет. и металловед., 5, 193 (1957).
Разогревание электронного газа и процессы переноса в проводниках.
4267. Шалыт С. С., ФТТ, 3, 2887 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Эффективная масса электронов в арсениде индия.
4268. Шалыт С. С., Эфрос А. Л., ФТТ, 4, 1233 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
К вопросу о квантовой осцилляции гальваномагнитных эффектов в арсениде и антимониде индия.
4269. Шалыт С. С. (см. [3026, 3820]).
4270. Sham L. J., Proc. Phys. Soc., 78, 895 (1961).
Рассмотрение электрон-фононного взаимодействия методом псевдопотенциала.
4271. Sham L. J., Proc. Phys. Soc., 81, 934 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Расчет потенциалов деформации в кремнии.
4272. Sham L. J., Ziman J. M., Solid State Phys., 15, 223 (1963).
Электрон-фононное взаимодействие.
4273. Sham L. J. (см. [3005]).
4274. Shariga Y., Lax V., Phys. Rev., 138, A1191 (1965). (Гл. 5, § 5.)
Форма линии и амплитуда гигантских квантовых осцилляций поглощения в ультрафиолетовой области.
4275. Shariga Y. (см. [3541]).
4276. Shaw W. C., Hudson D. E., Danielson G. C., Phys. Rev., 107, 419 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Электрические свойства монокристаллов бора.
4277. Шека Д. И., ФТТ, 6, 922 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Спин-орбитальное расщепление дырочных зон в кристаллах типа алмаза.
4278. Шека Д. И. (см. [4658]).
4279. Shep Y. R., Bloembergen N., Phys. Rev., 137, A1787, (1965). (Гл. 8, § 5.)
Теория стимулированного бриллюэновского и рамановского рассеяния.
4280. Sherry P. V., Coulson C. A., Proc. Phys. Soc., B69, 1326 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Распределение частот колебаний графита. I. Колебания одиночного слоя нормально к его плоскости.
4281. Shibuя M., Phys. Rev., 99, 1189 (1955).
Задача о горячих электронах в полупроводниках со сферическими энергетическими поверхностями.
4282. Shibuя M. (см. [4205]).
4283. Shimouchi T., Journ. Chem. Phys., 23, 2465 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Расчет собственных значений и векторов для секулярных уравнений теории колебаний.
4284. Shinozawa S., Journ. Fac. Sci. Hokkaido Univ., 4, 377 (1955).
Электронная структура вокруг примесей в одновалентных металлах.
4285. Shinozawa S., Journ. Phys. Soc. Japan, 16, 1963 (1961).
Экранирование статического заряда в металле.

4286. Shirane G., Jona F., Pepinsky R., Proc. Inst. Rad. Eng., 43, 1738 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Некоторые аспекты сегнетоэлектричества.
4287. Shirane G., Pepinsky R., Frazer B. C., Phys. Rev., 97, 1179 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Изучение сегнетоэлектрического $PbTiO_3$ с помощью дифракции рентгеновских лучей и нейтронов.
4288. Shirane G., Dappner H., Pepinsky R., Phys. Rev., 105, 856 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Изучение орторомбического $BaTiO_3$ с помощью дифракции нейтронов.
4289. Шкляревский И. Н., Падалка В. Г., Оптика и спектроскопия, 6, 176 (1959). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект и оптические постоянные меди, серебра, золота и никеля в инфракрасной области спектра.
4290. Шнейдер А. Д., Гаврищак И. В., ФТТ, 5, 1208 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Исследование электрических свойств дырочных полупроводников системы $HgTe-CdTe$.
4291. Shockley W., Bell Syst. Techn. Journ., 28, 435 (1949).
Теория $p-n$ -переходов в полупроводниках и транзисторов с $p-n$ -переходами.
4292. Shockley W., Phys. Rev., 79, 191 (1950). (Гл. 3, § 10.)
Влияние магнитного поля на проводимость. «Интегралы по трубкам».
4293. Shockley W., Phys. Rev., 90, 491 (1953). (Гл. 3, § 6, 8 и 10.)
Циклотронный резонанс, магнетосопротивление и зоны Бриллюэна в полупроводниках.
4294. Shockley W., Last J. T., Phys. Rev., 107, 392 (1957).
Статистика распределения заряда по локальным центрам в полупроводниках.
4295. Shockley W., Proc. Inst. Rad. Eng., 46, 973 (1958).
Электроны, дырки и ловушки.
4296. Shockley W., Phys. Rev., 110, 1207 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Предсказание эффектов междолинного рассеяния в германии.
4297. Shockley W. (см. [1110, 1111, 3391, 704, 4170, 4174, 4175, 780, 4628]).
4298. Shoenberg D., Nature, 167, 646 (1951). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в алюминии и сурьме.
4299. Shoenberg D., Nature, 170, 569 (1952). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в сильных полях.
4300. Shoenberg D., Phil. Trans. Roy. Soc., 245, 1 (1952). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена.
4301. Shoenberg D., Physica, 19, 791 (1953). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена.
4302. Shoenberg D., Nature, 183, 171 (1959). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в меди.
4303. Shoenberg D., Phil. Mag., 5, 105 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в меди, серебре и золоте.
4304. Shoenberg D., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 74. (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена.
4305. Shoenberg D., Proc. Phys. Soc., 79, 1 (1962). (Гл. 3, § 9.)
Эффект де Гааза — ван Альфена и электронная структура металлов.
4306. Shoenberg D., Phil. Trans. Roy. Soc., A255, 85 (1962). (Гл. 3, § 9—11.)

- Поверхности Ферми меди, серебра и золота. I. Эффект де Гааза — ван Альфена.
4307. Shoenberg D. (см. [1793]).
4308. Shogenji K., Sato T., Joun. Phys. Soc. Japn, 18, 146 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления в кристаллах PbTe p -типа.
4309. Shogenji K. (см. [4878]).
4310. Скубенко А. Ф., Лаптий С. В., ФТТ, 4, 449 (1962).
Оптические свойства монокристаллов Sb_2S_3 .
4311. Shull H., Löwdin P. O., Joun. Chem. Phys., 25, 1035 (1956).
Корреляционное расщепление в гелиево-подобных ионах.
4312. Shull H. (см. [3353]).
4313. Силин В. П., ЖЭТФ, 33, 495 (1957).
К теории вырожденной электронной жидкости.
4314. Силин В. П., ЖЭТФ, 33, 1227 (1957).
Колебания ферми-жидкости, находящейся в магнитном поле.
4315. Силин В. П., ЖЭТФ, 33, 1282 (1957).
К теории аномального скин-эффекта в металлах.
4316. Силин В. П., ЖЭТФ, 34, 707 (1958).
Об оптических свойствах металлов в инфракрасной области.
4317. Силин В. П., ЖЭТФ, 34, 781 (1958).
К теории плазменных волн в вырожденной электронной жидкости.
4318. Силин В. П., Физ. мет. и металловед., 7, 331 (1959).
К теории проводимости.
4319. Силин В. П., ЖЭТФ, 36, 1443 (1959).
К вопросу об оптических постоянных проводников.
4320. Силин В. П., ЖЭТФ, 37, 273 (1959).
О коллективных потерях быстрых электронов при прохождении через вещество.
4321. Силин В. П., ФТТ, 1, 705 (1959).
Об определении эффективных масс носителей и оптических констант полупроводников.
4322. Силин В. П., ЖЭТФ, 38, 977 (1960).
К теории поглощения ультразвука в металлах.
4323. Sillars R. W., Proc. Phys. Soc., B68, 881 (1955).
Влияние полевой эмиссии на поведение полупроводниковых контактов.
4324. Silsbee H. B., Uehling E. A., Schmidt V. H., Phys. 133, A165 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Внутризонное движение дейтронов и сегнетоэлектричество в KD_2PO_4 .
4325. Silverstein S. D., Phys. Rev., 128, 631 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Влияние взаимодействия электронов на свойства металлов. I. Теплоемкость.
4326. Silverstein S. D., Phys. Rev., 130, 912 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Влияние электронной корреляции на свойства щелочных металлов.
4327. Silverstein S. D., Phys. Rev., 130, 1703 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Влияние взаимодействия электронов на свойства металлов. II. Электронный спиновый парамагнетизм.
4328. Simmons R. O., Balluffi R. W., Phys. Rev., 108, 278 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение меди при низких температурах.
4329. Simons S., Proc. Cambr. Phil. Soc., 53, 702 (1957). (Гл. 3, § 9.)
Поглощение звука очень высокой частоты в твердых диэлектриках.
4330. Simons S., Proc. Phys. Soc., 78, 316 (1961). (Гл. 2, § 4.)
Эффект Холла в одновалентных металлах при низких температурах.

4331. Simons S., Proc. Phys. Soc., **83**, 749 (1964). (Гл. 8, § 5.)
О взаимодействии длинноволновых фононов с тепловыми фононами.
4332. Simons S. (см. [2209]).
4333. Simpson J. H., Proc. Roy. Soc., **A197**, 269 (1949).
Распределение заряда и энергетические уровни захваченных электронов в ионных кристаллах.
4334. Simpson J. H., Proc. Phys. Soc., **71**, 761 (1958).
О тепловом и оптическом возбуждении центров окраски.
4335. Sinapoglu O., Journ. Chem. Phys., **36**, 564 (1962). (Гл. 11, § 7.)
О редукации многоэлектронной задачи с помощью теории возмущений.
4336. Sinapoglu O., Journ. Chem. Phys., **36**, 706, 3198 (1962). (Гл. 11, § 77.)
Многоэлектронная теория атомов и молекул. I. Оболочки и электронные пары и многоэлектронные корреляции. II.
4337. Sinapoglu O., Journ. Chem. Phys., **37**, 191 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Связи и внутримолекулярные силы.
4338. Sinapoglu O., Journ. Chem. Phys., **66**, 2283 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Некоторые аспекты квантовой теории атомов, молекул и их взаимодействий.
4339. Sinapoglu O., Fu-Tai Tsai, Journ. Chem. Phys., **38**, 1740 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Многоэлектронная теория атомов и молекул. III. Влияние корреляции орбиты.
4340. Sinapoglu O., Rev. Mod. Phys., **35**, 517 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Метод расчета многоэлектронных волновых функций.
4341. Sinapoglu O. (см. [2856, 2857]).
4342. Singh D. N., Bowers W. A., Phys. Rev., **116**, 279 (1959).
Колебательный спектр ванадия.
4343. Singh L., Trans. Faraday Soc., **54**, 1117 (1958).
Новый метод в задаче о диамагнитной анизотропии бензола. Анизотропия σ -электронов.
4344. Сирота Н. Н., ДАН СССР, **115**, 901 (1957).
О температурной зависимости теплоемкости твердых тел.
4345. Sjölander A., Arkiv Fys., **14**, 315 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Многофононные процессы в некогерентном рассеянии медленных нейтронов кристаллами.
4346. Skyrme T. H., Proc. Roy. Soc., **A239**, 399 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Коллективное движение в квантовой механике.
4347. Slack G. A., Phys. Rev., **105**, 832 (1957). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5.)
Теплопроводность кристаллов хлористого калия, содержащих кальций.
4348. Sladek R. J., Phys. Rev., **110**, 817 (1958). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления в монокристаллическом и поликристаллическом арсениде индия.
4349. Sladek R. J., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 515 (1959).
Проводимость по примесной зоне в сильных магнитных полях.
4350. Sladek R. J., Journ. Phys. Chem. Solids, **16**, 1 (1960). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление InSb высокой чистоты в квантовом пределе.
4351. Sladek R. J., Keyes R. W., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 166. (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Новые гальваномагнитные эффекты в германии n -типа ниже $4,2^\circ \text{K}$.
4352. Slater J. C., Phys. Rev., **76**, 1592 (1949). (Гл. 2, § 5 и 6; приложение 1, § 2 и приложение 2, § 1.)
Электроны в искаженных периодических решетках.

4353. Slater J. C., Phys. Rev., 78, 748 (1950). (Гл. 4, § 4; гл. 8, § 5.)
Поправка Лоренца в титанате бария.
4354. Slater J. C., Phys. Rev.; 81, 385 (1951). (Гл. 10, § 2; гл. 11, § 7.)
Упрощение метода Хартри — Фока.
4355. Slater J. C., Phys. Rev., 91, 528 (1953). (Гл. 11, § 4 и 7.)
Обобщенный метод самосогласованного поля.
4356. Slater J. C., Rev. Mod. Phys., 30, 197 (1958). (Гл. 6, § 3; гл. 8, § 5.)
Взаимодействие волн в кристаллах.
4357. Slater J. C., Rev. Mod. Phys., 35, 484 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Электронная структура атомов. Метод Хартри — Фока и корреляция.
4358. Slater J. C., в книге «Advances in Quantum Chemistry», New York, 1964, p. 35.
Расчеты энергетических зон с помощью метода присоединенных плоских волн.
4359. Slater J. C. (см. [3052]).
4360. Sledzik J., Acta Phys. Polon., 17, 463 (1958); 18, 57, 295 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Модификация коллективного описания взаимодействия электронов в кристаллах по Бому и Пайнсу. I, II, III. Спин-волновая теория ферромагнетизма.
4361. Sledzik J., Acta Phys. Polon., 19, 383 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Некоторые замечания относительно коллективного описания взаимодействия электронов. Функция распределения.
4362. Sledzik J., Acta Phys. Polon., 20, 3, 23, (1961). (Гл. 11, § 7.)
Коллективные колебания в электронном газе металлической плотности. I, II. Корреляционная энергия.
4363. Slutsky L. J., Garland C. W., Phys. Rev., 107, 972 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные магния от 4,2 до 300° К.
4364. Slutsky L. J., Garland C. W., Journ. Chem. Phys., 28, 787 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки металлов с гексагональной плотноупакованной решеткой.
4365. Slutsky L. J., Journ. Chem. Phys., 29, 1191 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки металлов с гексагональной плотноупакованной решеткой. III.
4366. Slutsky L. J., Livingston A., Journ. Chem. Phys., 32, 1093 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки и теплоемкость индия.
4367. Slutsky L. J. (см. [2215]).
4368. Slykhouse T. E., Drickamer H. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 207 (1958). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Влияние давления на край поглощения в галогенидах серебра.
4369. Slykhouse T. E., Drickamer H. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 210 (1958). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Влияние давления на край оптического поглощения германия и кремния.
4370. Slykhouse T. E. (см. [1916]).
4371. Смирнов А. А., Тихонова Е. А., ФТТ, 1, 1393 (1959).
К теории рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов многокомпонентными сплавами замещения.
4372. Смирнов А. А. (см. [1693, 1895, 3538]).
4373. Смирнов Л. С., Вавилов В. С., ЖТФ, 27, 427 (1957).
О вероятности рекомбинационного захвата носителей заряда дефектами типа Френкеля в германии *n*-типа.

4374. Smith G. E., Phys. Rev., **115**, 1561 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Аномальный скин-эффект в висмуте.
4375. Smith G. E., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 182.
(Гл. 5, § 1.)
Аномальный скин-эффект.
4376. Smith G. E., Journ. Phys. Chem. Solids, **20**, 168 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Эффективная масса дырок в висмуте.
4377. Smith G. E., Hebel L. C., Buchsbaum S. I., Phys. Rev., **129**, 154 (1963). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Смешанный резонанс и циклотронный резонанс на «наклонных орбитах» в висмуте.
4378. Smith H. M. J., Phil. Trans. Roy. Soc., **A241**, 105 (1948). (Гл. 8, § 5.)
Теория колебаний и рамановский спектр решетки алмаза.
4379. Smith R. A., Adv. Phys., **2**, 321 (1953).
Фотопроводники в инфракрасной области.
4380. Smith R. A. (см. [4840]).
4381. Smith S. D., Moss T. S., Taylor K. W., Journ. Phys. Chem. Solids, **11**, 131 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Энергетическая зависимость электронной массы антимонида индия, определенная из измерений инфракрасного эффекта Фарадея.
4382. Smith S. D. (см. [3656]).
4383. Смоленский Г. А., Изв. АН СССР, сер. физич., **20**, 163 (1956).
Новые сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики кислородно-октаэдрического типа.
4384. Смоленский Г. А., ЖТФ, **27**, 1778 (1957).
К вопросу о возникновении спонтанной поляризации в кристаллах.
4385. Смоленский Г. А., Аграновская А. И., ФТТ **1**, 1562 (1959).
Диэлектрическая поляризация ряда соединений сложного состава.
4386. Смоленский Г. А., Исупов В. А., Аграновская А. И., ФТТ, **3**, 895 (1961).
Сегнетоэлектрики кислородно-октаэдрического типа со слоистой структурой.
4387. Солин М. Д., ФТТ, **5**, 1586 (1963).
К вопросу о температурной зависимости электропереноса в металлах.
4388. Stollatt M., Blackman M., Proc. Phys. Soc., **A64**, 683, 941 (1951).
Устойчивость решетки и ориентированный рост.
4389. Stollatt M., Proc. Phys. Soc., **A65**, 109 (1952). (Гл. 8, § 5.)
Частотный спектр двумерной ионной решетки.
4390. Spow E. C., Canfield J. M., Waber J. T., Phys. Rev., **135**, A969 (1964).
Полные энергии согласно численным расчетам по методу самосоглазованного поля.
4391. Собельман И. И., Фейнберг Е. Л., ЖЭТФ, **34**, 494 (1958).
Некоторые оптические эффекты плазменных колебаний в твердом теле.
4392. Соболев В. В., ФТТ, **6**, 906 (1964).
Сложная структура валентной зоны кристаллов группы $A^{II}B^{VI}$.
4393. Sodha M. S., Phys. Rev., **107**, 1266 (1957).
Зависимость подвижности от электрического поля в невырожденных полупроводниках.
4394. Sodha M. S., Eastman P. C., Phys. Rev., **110**, 1314 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Зависимость холловской подвижности носителей в невырожденных полупроводниках от электрического поля.

4395. Sodha M. S., Eastman P. C., Phys. Rev., 112, 44 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Холловская подвижность носителей в примесных невырожденных полупроводниках.
4396. Sodha M. S., Agrawal D. B., Canad. Journ. Phys., 36, 707 (1958).
Подвижность носителей в невырожденных полупроводниках в слабых полях.
4397. Sodha M. S., Eastman P. C., Zs. Phys., 150, 242 (1958).
Подвижность электронов в невырожденных полупроводниках с учетом электрон-электронного рассеяния.
4398. Sodha M. S., Varshni Y. P., Zs. Phys., 153, 555 (1959). Phys. Rev., 114, 717 (1959).
Кинетические свойства невырожденных полупроводников с учетом электрон-электронного рассеяния.
4399. Соколов А. В., Черепанов В. И., Штейнберг И. Б., ЖЭТФ, 28, 330 (1955).
Дисперсионные формулы квантовой оптики металлов в многоэлектронной теории с учетом электронного затухания.
4400. Соколов А. В., Харус Г. И., Ширковский В. П., ФТТ, 1, 354 (1959).
О двойном лучепреломлении одноосных полупроводниковых кристаллов.
4401. Sondheimer E. H., Proc. Camb. Phil. Soc., 43, 571 (1947).
Теория термо-э. д. с. металлов.
4402. Sondheimer E. H., Wilson A. H., Proc. Roy. Soc., A190, 435 (1947). (Гл. 3, § 10.)
Теория магнетосопротивления в металлах.
4403. Sondheimer E. H., Phys. Rev., 80, 401 (1950). (Гл. 3, § 10.)
Влияние поперечного магнитного поля на проводимость тонких металлческих пленок.
4404. Sondheimer E. H., Proc. Roy. Soc., A203, 75 (1950).
Теория явлений переноса в металлах.
4405. Sondheimer E. H., Wilson A. H., Proc. Roy. Soc., A210, 173 (1951).
Диамагнетизм свободных электронов.
4406. Sondheimer E. H., Proc. Camb. Phil. Soc., 48, 744 (1952).
К вопросу о диамагнетизме свободных электронов.
4407. Sondheimer E. H., Adv. Phys., 1, 1 (1952).
Средняя длина свободного пробега электронов в металлах.
4408. Sondheimer E. H., Proc. Roy. Soc., A224, 260 (1954). (Гл. 5, § 1.)
Теория аномального скин-эффекта в анизотропных металлах.
4409. Sondheimer E. H., Proc. Roy. Soc., A234, 391 (1956).
Соотношения Кельвина в термоэлектрических явлениях.
4410. Sondheimer E. H., Canad. Journ. Phys., 34, 1246 (1956).
Электрон-фононное равновесие и явления переноса в металлах при низких температурах.
4411. Sondheimer E. H. (см. [1832, 1974, 2345, 2465, 2520, 2522, 2718, 2719, 3417, 4087, 4088]).
4412. Sosnowski J., Kozubowski J., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 1021 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Фононные законы дисперсии для монокристалла меди в направлении [100].
4413. Sosnowski L., Phys. Rev., 107, 1193 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Вклад носителей тока в отражение света от полупроводников.
4414. Sosnowski L., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 142 (1959).
Электронные процессы на границах зерен.

4415. Soule D. E., Phys. Rev., **112**, 698 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 10 и 11.)
Зависимость эффекта Холла и магнетосопротивления монокристаллов графита от магнитного поля.
4416. Soule D. E., Phys. Rev., **112**, 708 (1958). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Анализ гальваномагнитных осцилляций типа де Гааза — ван Альфена в графите.
4417. Soule D. E., McClure J. W., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 29 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура и кинетические свойства монокристаллического графита.
4418. Soule D. E., McClure J. W., Smith L. B., Phys. Rev., **134**, A453 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Исследование эффекта Шубникова — де Гааза. Определение поверхности Ферми в графите.
4419. Soven P., Phys. Rev., **137**, A1706, A1717 (1965). (Гл. 3, § 11.)
Релятивистская зонная структура и поверхность Ферми таллия, I, II.
4420. Sragha M. J., Physica, **25**, 217 (1959). (Приложение 5, § 7.)
Об аддитивности сил Лондона — Ван дер Ваальса. Обобщение лондоновской осцилляторной модели.
4421. Sragha M. J., Physica, **25**, 444 (1959). (Приложение 5, § 7.)
Силы Ван дер Ваальса и флуктуационные явления.
4422. Spear W. E., Mort J., Proc. Phys. Soc., **81**, 130 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронный и дырочный перенос в кристалле CdS.
4423. Spear W. E. (см. [904]).
4424. Spector H. N., Phys. Rev., **120**, 1261 (1960).
Определение фермиевской скорости с помощью эффекта наклонных орбит в сильном поле.
4425. Spector H. N., Phys. Rev. Lett., **6**, 407 (1961).
Построение поверхности Ферми с помощью совместного использования геометрического резонанса и эффекта наклонных орбит.
4426. Spector H. N., Phys. Rev., **125**, 1192 (1962). (Гл. 3, § 9.)
Магнетоакустические эффекты в наклонных магнитных полях.
4427. Spector H. N., Phys. Rev., **127**, 1084 (1962).
Усиление акустических волн обусловленное взаимодействием с электронами проводимости.
4428. Spector H. N., Phys. Rev., **132**, 522 (1963).
Квантовые эффекты в усилении звука в магнитном поле.
4429. Spector H. N., Phys. Lett., **5**, 24 (1963). (Гл. 3, § 9.)
Построение поверхности Ферми с помощью магнетоакустических резонансов в усилении звука.
4430. Spector H. N., Phys. Rev. Lett., **6**, 233 (1963).
Квантовые резонансы в усилении звука.
4431. Spector H. N., Phys. Rev., **134**, A507 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Влияние внешнего электрического поля на скорость звука в полупроводниках и полуметаллах.
4432. Spicer W. E., Sommer A. H., Journ. Phys. Chem. Solids, **8**, 437, 442 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Интерметаллические полупроводники, содержащие щелочные металлы.
4433. Spicer W. E., Simon R. E., Phys. Rev. Lett., **9**, 385 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Исследования зонной структуры кремния с помощью внешнего фотоэффекта.
4434. Spicer W. E., Phys. Rev., **125**, 1297 (1962) (Гл. 3, § 11.)

- Внешний фотоэффект и зонная структура полупроводникового соединения CsAu.
4435. Spicer W. E., Simon R. E., Journ. Phys. Chem. Solids, **23**, 1817 (1962).
Использование внешнего фотоэффекта для исследования зонной структуры кремния и других полупроводников.
4436. Spicer W. E., Phys. Rev. Lett., **11**, 243 (1963).
Оптические переходы без сохранения квазимпульса.
4437. Spicer W. E., Berglund C. N., Phys. Rev. Lett., **12**, 9 (1964). (Гл. 3 § 11.)
d-зона меди.
4438. Spicer W. E. (см. [1192, 1193, 2887]).
4439. Spitzer W. G., Fan H. Y., Phys. Rev., **99**, 1893 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение в антимониде индия.
4440. Spitzer W. G., Fan H. Y., Phys. Rev., **106**, 882 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Определение оптических постоянных и эффективной массы носителей заряда в полупроводниках.
4441. Spitzer W. G., Fan H. Y., Phys. Rev., **108**, 268 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Инфракрасное поглощение в кремнии *n*-типа.
4442. Spitzer W. G., Mead C. A., Journ. Phys. Chem. Solids, **25**, 443 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Минимум зоны проводимости CdTe.
4443. Spitzer W. G., (см. [2009, 2928, 3548]).
4444. Spong F. W., Kip A. F., Phys. Rev., **137**, A431 (1965). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в алюминии.
4445. Spong F. W. (см. [3619]).
4446. Spry W. J., Scherer P. M., Phys. Rev., **120**, 826 (1960). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в графите между 3 и 85 *кэВ*.
4447. Squire C. F., Briscoe C. V., Norwood M. H., Scales W. W., Low F. J., Physica, **24**, S170 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки щелочногалогидных кристаллов при температурах жидкого гелия согласно экспериментальным данным по упругим постоянным, теплоемкостям и ядерному магнитному резонансу.
4448. Squire C. F. (см. [1365]).
4449. Squires G. L., Phys. Rev., **103**, 304 (1956). (Гл. 8, § 1.)
Связь между частотами колебаний кристалла и рассеянием медленных нейтронов.
4450. Srivastava P. L., Srivastava R. S., Proc. Phys. Soc., **81**, 586 (1963).
Теплоемкости натрия и калия, определенные по методу Тойя.
4451. Stachowiak H., Bull. Acad. Polon. Sci. Ser. Sci. Techn., **10**, 409 (1962). (Гл. 3, § 10.)
Об открытых электронных орбитах в магнитном поле для поверхности Ферми в форме сети.
4452. Stachowiak H., Acta Phys. Polon., **23**, 383 (1963). (Гл. 3, § 10.)
Открытые электронные орбиты в магнитном поле для случая «сетчатой» поверхности Ферми.
4453. Stark R. W., Eck T. G., Gordon W. L., Moazed F., Phys. Rev. Lett., **8**, 360 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Исследование поверхности Ферми магния по данным о магнетосопротивлении.
4454. Stark R. W., Phys. Rev. Lett., **9**, 482 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Осцилляционный магнитный пробой в цинке.

4455. Stark R. W., Eck T. G., Gordon W. L., Phys. Rev., 133, A443 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Исследование поверхности Ферми магния по гальваномагнитным данным.
4456. Stark R. W., Phys. Rev., 135, A1698 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Влияние магнитного пробоя на гальваномагнитные свойства цинка.
4457. Стасюк И. В., Глауберман А. Е., Укр. физич. журн., 6, 642 (1961).
Многоэлектронная теория полупроводников с примесями.
4458. Стасюк И. В. (см. [2278, 2279]).
4459. Stutz H., de Mars G. A., Phys. Rev., 111, 169 (1958).
Электропроводность по медленным поверхностным состояниям в полупроводниках.
4460. Ставицкая Т. С., Сильбанс Л. С., ЖТФ, 28, 484 (1958).
О влиянии вырождения на эффективность полупроводниковых термоэлементов.
4461. Steele M. C., Phys. Rev., 88, 451 (1952).
Приложение теории чисел к расчету магнитных свойств электронного газа.
4462. Steele M. C., Babiskin J., Phys. Rev., 98, 359 (1955). (Гл. 3, § 11.)
Осцилляции термомагнитных свойств монокристалла висмута при температурах жидкого гелия.
4463. Steele M. C., Phys. Rev., 99, 1751 (1955). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Осцилляции гальваномагнитных свойств монокристаллов сурьмы при температурах жидкого гелия.
4464. Steele M. C. (см. [1196, 1197, 2509, 3149]).
4465. Stehle P., Phys. Rev., 110, 1458 (1958).
Расчет рассеяния электронов на электронах.
4466. Steigmeier E. F., Abeles B., Phys. Rev., 136, A1149 (1964).
Рассеяние фононов на электронах в сплавах Ge—Si.
4467. Steinberg M. S., Phys. Rev., 109, 1486 (1958).
Вязкость электронного газа в металлах.
4468. Steinberg M. S., Phys. Rev., 110, 772 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Магнитные эффекты в затухании поперечных акустических волн на электронах проводимости.
4469. Steinberg M. S., Phys. Rev., 110, 1467 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Резонансное поглощение звука в металлах.
4470. Steinberg M. S., Phys. Rev., 111, 425 (1958). (Гл. 3, § 9.)
Затухание и дисперсия ультразвука в металлах при низких температурах.
4471. Stephen M. J., Lidiard A. B., Journ. Phys. Chem. Solids, 9, 43 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Эффект Фарадея в полупроводниках.
4472. Stephen M. J., Zalewski K., Proc. Roy. Soc., A270, 435 (1963). (Гл. 10, § 1.)
О классическом приближении, содержащемся в теории Томаса—Ферми.
4473. Stern E. A., Ferrell R. A., Phys. Rev., 120, 130 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Поверхностные плазменные колебания вырожденного электронного газа.
4474. Stern E. A., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 50. (Гл. 11, § 7.)
Роль взаимодействий в определении поверхностей Ферми.
4475. Stern E. A., Phys. Rev., 121, 397 (1961). (Гл. 11, § 7.)

- Влияние корреляции на электронную теплоемкость Na.
4476. Stern E. A., Phys. Rev., 112, 1773 (1961). (Гл. 11, § 7.)
- Роль взаимодействий в определении поверхностей Ферми.
4477. Stern E. A., Phys. Rev. Lett., 10, 91 (1963).
- Построение поверхности Ферми.
4478. Stern E. A., McGroddy J. C., Harte W. E., Phys. Rev., 135, A1306 (1964).
- Эффект Фарадея при полярном отражении в металлах.
4479. Stern E. A. (см. [1183, 2041]).
4480. Stern F., Talley R. M., Phys. Rev., 100, 1638 (1955).
- Примесная зона в полупроводнике с малой эффективной массой.
4481. Stern F., Talley R. M., Phys. Rev., 108, 158 (1957). (Гл. 3, § 11.)
- Оптическое поглощение в арсениде индия β -типа.
4482. Stern F., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 277 (1959).
- Эффекты, связанные с наличием линейного члена в законе дисперсии, для валентной зоны интерметаллических полупроводников.
4483. Stern F., Phys. Rev. Lett., 6, 675 (1961).
- Несферическое распределение $3d$ -электронов в объемноцентрированных кубических металлах.
4484. Stern F., Solid State Phys., 15, 300 (1963). (Гл. 5, § 5.)
- Элементарная теория оптических свойств твердых тел.
4485. Stern F., Phys. Rev., 133, A1653 (1964). (Гл. 5, § 5.)
- Дисперсия показателя преломления вблизи края поглощения полупроводников.
4486. Stern F. (см. [2395, 3180]).
4487. Sternglass E. J., Nature, 178, 1387 (1956). (Гл. 11, § 7.)
- Происхождение характеристических энергетических потерь электронов в твердых телах.
4488. Sternheimer R. M., Phys. Rev., 96, 951 (1964). (Приложение 5, § 7.)
- Электронные поляризуемости ионов, определенные из уравнений Хартри — Фока
4489. Sternheimer R. M., Phys. Rev., 107, 1565 (1957). (Приложение 5, § 7.)
- Электронные поляризуемости атомов.
4490. Stevenson M. J., Phys. Rev., 3, 464 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
- Циклотронный резонанс в $CdAs_2$.
4491. Stevenson M. J., Semicond. Phys. Conf. Prague, 1960, New York, 1961, p. 1083. (Гл. 3, § 8 и 11.)
- Циклотронный резонанс в полупроводниках типа $A^{III}B^V$.
4492. Stevenson M. J. (см. [3535]).
4493. Stewart A. T., Brockhouse B. N., Rev. Mod. Phys., 30, 250 (1958). (Гл. 8, § 1.)
- Колебательные спектры ванадия и сплавов $MnCo$ по данным нейтронной спектроскопии.
4494. Stewart A. T., Phys. Rev., 133, A1651 (1964). (Гл. 3, § 11.)
- $Li-Mg$, сплав с почти свободными электронами.
4495. Stewart A. T. (см. [1368, 1371, 4865, 4866]).
4496. Stickler J. J., Zeiger H. J., Heller G. S., Phys. Rev., 127, 1077 (1962). (Гл. 3, § 11.)
- Квантовые эффекты в Ge и Si . I.
4497. Stickler J. J. (см. [4052]).
4498. Stierwald D. L., Potter R. F., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 99 (1962). (Гл. 5, § 5.)
- Решеточные полосы поглощения, наблюдаемые в кремнии с помощью измерения спектральной излучательной способности.

4499. С т и л ь б а н с Л. С., Б о к Б. И., Л и ф ш и ц Э. Л., ДАН СССР, 111, 1011 (1956).
О механизме рассеяния носителей в теллуристом свинце.
4500. С т и л ь б а н с Л. С., Phys. Chem. Solids, 8, 123 (1959).
Механизм рассеяния носителей на фононе и дефектах решетки.
4501. С т и л ь б а н с Л. С. (см. [2245, 2314, 2661, 4460]).
4502. S t i l e s P. J., B u r s t e i n E., L a n g e n b e r g D. N., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2714 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в PbTe *p*-типа и PbS *n*-типа.
4503. S t i l e s P. J., B u r s t e i n E., L a n g e n b e r g D. N., Phys. Rev. Lett., 6, 667 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Наблюдение осцилляций де Гааза — ван Альфена в PbTe *p*-типа.
4504. S t i l e s P. J., B u r s t e i n E., L a n g e n b e r g D. N., Phys. Rev. Lett., 9, 257 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс Азбеля — Канера в PbTe *p*-типа.
4505. S t i l e s P. J., B u r s t e i n E., L a n g e n b e r g D. N., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 577. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Изучение уровней Ландау в PbTe *p*-типа; циклотронный резонанс Азбеля — Канера.
4506. S t i l e s P. J. (см. [1465, 1466, 2522, 4629]).
4507. S t i n c h c o m b e R. B., Proc. Phys. Soc., 78, 275 (1961). (Гл. 3, § 10.)
Квантовая теория магнетосопротивления. I. Слабые поля.
4508. S t o c k e r D., Proc. Roy. Soc., A270, 397 (1962). (Гл. 11, § 1.)
Электронные свойства тетраэдрических интерметаллических соединений. IV. Определение валентных связей методом линейной комбинации связывающих орбит.
4509. S t o c k e r D. (см. [1649]).
4510. S t o l z H., Phys. Status Solidi, 1, 328 (1961).
К квантовой теории магнетоакустических эффектов в металлах.
4511. S t o l z H., Phys. Status Solidi, 1, 451 (1961). (Гл. 11, § 7.)
К квантовой теории поперечных акустических колебаний в плазменной модели металлов.
4512. S t o n e P. M., A u e r P. L., Phys. Rev., 138, A695 (1965). (Гл. 3, § 8.)
Возбуждение электростатических волн вблизи гармоник электронных циклотронных частот.
4513. S t o n e y R., Proc. Roy. Soc., A232, 447 (1955).
Распространение поверхностных упругих волн в кубическом кристалле.
4514. S t r a c h a n C., Proc. Phys. Soc., 73, 433 (1959). (Гл. 2, § 4.)
Спин-орбитальное взаимодействие и аномальный эффект Холла.
4515. S t r a t t o n R., Proc. Phys. Soc., B68, 746 (1955).
Полевая холодная эмиссия из полупроводников.
4516. S t r a t t o n R., Proc. Roy. Soc., A242, 355 (1957).
Влияние межэлектронных столкновений на проводимость и пробой в ковалентных полупроводниках.
4517. S t r a t t o n R., Phil. Mag., 2, 422 (1957).
Влияние свободных электронов на решеточную теплопроводность при высоких температурах.
4518. S t r a t t o n R., Phil. Mag., 2, 702 (1957).
О поверхностной свободной энергии и теплоемкости металла.
4519. S t r a t t o n R., Brit. Journ. Appl. Phys., 8, 315 (1957).
К элементарной теории термоэлектрических явлений.
4520. S t r a t t o n R., Proc. Roy. Soc., A246, 1246 (1958).
Влияние межэлектронных столкновений на проводимость и пробой в полярных кристаллах.

4521. Stratton R., Journ. Electron. Control, **5**, 157 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Об эффекте горячих электронов в германии *n*-типа.
4522. Стрижевский В. Л., ФТТ, **2**, 1806 (1960).
К теории дисперсии и поглощения света в кристаллах.
4523. Стрижевский В. Л., ФТТ, **3**, 2929 (1961).
К теории комбинационного рассеяния света в кристаллической среде.
4524. Стрижевский В. Л., ФТТ, **4**, 1492 (1962).
Квантование электромагнитного поля в кристаллической среде при наличии дисперсии.
4525. Стрижевский В. Л., ФТТ, **5**, 1511 (1963).
О приближении теории поляризуемости при рассмотрении комбинационного рассеяния света в кристаллах.
4526. Stuckes A. D., Phys. Rev., **107**, 427 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность антимонида индия.
4527. Stü ckma n n F., Zs. Phys., **143**, 348 (1955).
Отрицательный фотоэффект в полупроводниках.
4528. St u m p f H., Zs. Naturforsch., **11a**, 259 (1956).
Новый квантовомеханический принцип в теории проводимости и критика теории Блоха.
4529. St u m p f H., Wa g n e r M., Zs. Naturforsch., **15a**, 30 (1960).
Динамическое взаимодействие электронов с решеткой в искаженных ионных кристаллах.
4530. St u m p f H. (см. [2153, 2154]).
4531. Suirgock P. A., Proc. Roy. Soc., **A242**, 277 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Нелинейные эффекты в электронной плазме.
4532. Субашиев В. К., Дубровский Г. Б., ФТТ, **6**, 1303 (1964).
Непрямые переходы и структура валентной зоны кремния.
4533. Suchan H. L., Balchan A. S., Drickamer H. G., Journ. Phys. Chem. Solids, **10**, 343 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Влияние давления на край поглощения BaTiO_3 и TiO_2 .
4534. Suchan H. L., Drickamer H. G., Journ. Phys. Chem. Solids, **11**, 111 (1959). (Гл. 5, § 5.)
Влияние давления на край поглощения некоторых молекулярных соединений.
4535. Suchet J. P., Journ. Phys. Chem. Solids, **12**, 74 (1959).
Правила предсказания полупроводниковых свойств минеральных кристаллических структур.
4536. Suchet J. P., Journ. Phys. Chem. Solids, **16**, 265 (1960).
Атомные радиусы электроотрицательности и энергии активации в минеральных полупроводниковых соединениях.
4537. Suchet J. P., Journ. Phys. Chem. Solids, **21**, 156 (1961).
Степени ионной связи, эффективные заряды и подвижности электронов в минеральных полупроводниковых соединениях.
4538. Sueoka O., Journ. Phys. Soc. Japan., **19**, 2239 (1964).
Плазменные колебания электронов в LiF .
4539. Sueoka O., Fujimoto F., Journ. Phys. Soc. Japan., **20**, 569 (1965).
Плазменные колебания электронов в сплавах. II. Сплав $\text{Ag}-\text{Au}$.
4540. Sueoka O. (см. [2156]).
4541. Suffczynski M., Proc. Phys. Soc., **73**, 671 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства благородных металлов.
4542. Suffczynski M., Michaelson S., Proc. Phys. Soc., **75**, 802 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Расчет оптических постоянных благородных металлов.
4543. Suffczynski M., Phys. Rev., **117**, 663 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Оптические постоянные металлов.

4544. Suffczynski M., Proc. Phys. Soc., 77, 1042 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Фарадея для прямых магнетооптических переходов в германии.
4545. Suffczynski M., Phys. Status Solidi, 4, 3 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства благородных металлов.
4546. Sugihara K., Sato H., Jourп. Phys. Soc. Japan, 18, 332 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электропроводность графита.
4547. Sugiyama K., Kobayashi A., Jourп. Phys. Soc. Japan, 18, 163 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Пьезосопротивление и магнетосопротивление при примесной проводимости в германии.
4548. Suhl H., Werthamer N. R., Phys. Rev., 122, 359 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Высшие приближения метода беспорядочной фазы в задаче многих тел.
4549. Suhl H., Fredkin D. R., Phys. Rev., 131, 1063 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Многочелостная теория локализованных d -состояний в металлах. I. Локализованный момент.
4550. Sullivan J. J., Jourп. Phys. Chem. Solids, 25, 1039 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Колесания решетки кристаллов со структурой вюрцита.
4551. Suprek I., Zs. Phys., 149, 324 (1957).
Электропроводность металлов при низких температурах.
4552. Сурис Р. А., ФТТ, 3, 1795 (1961). (Гл. 11, § 7.)
К теории систем взаимодействующих ферми-частиц.
4553. Süßmann G., Zs. Naturforsch., 11a, 1 (1956); 13a, 1 (1958).
Об импульсе звуковых квантов. I, II.
4554. Susman J. A., Thellung A., Proc Phys. Soc., 81, 1122 (1963).
Теплопроводность идеального диэлектрического кристалла в отсутствие процессов переброса.
4555. Sutton P. M., Phys. Rev., 99, 1826 (1955). (Гл. 8, § 6.)
Вычисление средней дебаевской температуры кубических кристаллов из упругих констант. II.
4556. Suzuki H., Hattori M., Ariyama K., Jourп. Phys. Soc. Japan, 16, 1947 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Теория циклотронного резонанса в анизотропных металлах.
4557. Suzuki H., Ariyama K., Jourп. Phys. Soc. Japan, 17, 704 (1962). (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс в тонких металлических пленках.
4558. Suzuki H. (см. [2502, 2507]).
4559. Suzuki T., Jourп. Phys. Soc. Japan, 16, 501 (1961).
Распределение электронов в кристалле Cu_2O .
4560. Swalen J. D., de Heer J., Jourп. Chem. Phys., 40, 378 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Расчеты методом альтернативных молекулярных орбит со многими параметрами для больших циклических систем со структурой замкнутых оболочек.
4561. Swan J. V., Phys. Rev., 135, A1467 (1964).
Характеристические энергетические потери электронов в натрии и калии.
4562. Swanson J. A., Phys. Rev., 99, 1799 (1955). (Гл. 2, § 4.)
Насыщение постоянной Холла в полупроводниках.
4563. Сыркин Л. Н., Кристаллография, 1, 274 (1956).
Исследование формы потенциального рельефа для ионов в кристаллах типа перовскита.

4564. Szasz L. Zs. Naturforsch., **14a**, 1014 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Об обобщении приближения Хартри — Фока с учетом корреляции.
4565. Szasz L., Zs. Naturforsch., **15a**, 909 (1960). (Гл. 11, § 7.)
О расчете корреляционной энергии электронов в атомах.
4566. Szasz L., Journ. Chem. Phys., **35**, 1072 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Об оценке интегралов в теории коррелированных электронных волновых функций.
4567. Szasz L., Journ. Chem. Phys., **37**, 193 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Конфигурации с одиночным замещением.
4568. Szasz L., Phys. Rev., **126**, 169 (1962); Journ. Math. Phys., **3**, 1147 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Задача многих тел в теории атома. I. Общая теория коррелированных волновых функций. II. Матричные элементы гамильтониана в системе коррелированных волновых функций.
4569. Szasz L., Phys. Lett., **3**, 263 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Парные корреляции в атоме Be.
4570. Szigeti B., Trans. Faraday Soc., **45**, 155 (1949). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Поляризуемость и диэлектрическая проницаемость ионных кристаллов.
4571. Szigeti B., Proc. Roy. Soc., **A204**, 51 (1950). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Сжимаемость и частота поглощения ионных кристаллов.
4572. Szigeti B., Proc. Roy. Soc., **A252**, 217 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Члены высших порядков в диэлектрической проницаемости ионных кристаллов.
4573. Szigeti B., Proc. Roy. Soc., **A258**, 377 (1960). (Гл. 5, § 5; гл. 8, § 5.)
Инфракрасные спектры кристаллов.
4574. Szigeti B., Proc. Roy. Soc., **A261**, 274 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Величина ангармонического вклада в статическую диэлектрическую проницаемость.
4575. Szigeti B., Journ. Phys. Chem Solids, **24**, 225 (1963).
Инфракрасное поглощение в валентных кристаллах, активированное примесью.
4576. Sziklas E. A., Phys. Rev., **138**, A1070 (1965).
Коллективные колебания плотного электронного газа, содержащего статический точечный заряд.
4577. Taft E. A., Arker L., Journ. Chem. Phys., **20**, 1648 (1952). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Внешний фотоэффект, связанный с поглощением в β -полосе в иондах щелочных металлов.
4578. Taft E. A., Philipp H. R., Arker L., Phys. Rev., **110**, 876. (1958). (Гл. 3, § 11.)
Внешний фотоэффект из валентной зоны AgBr.
4579. Taft E. A., Arker L., Phys. Rev., **138**, A197 (1965). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Оптические свойства графита.
4580. Taft E. A. (см. [1001—1003, 3885]).
4581. Takagi S., Journ. Phys. Soc. Japan, **13**, 278 (1958). (Гл. 8, § 1.)
О температурном диффузном рассеянии электронов. I. Вывод общих формул. II. Приложение к практическим проблемам.
4582. Takagi Y., Proc. Intern. Conf. Theor. Phys., Tokyo, 1953, p. 824. (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектричество и антисегнетоэлектричество некоторых ионных кристаллов.
4583. Takagi Y. (см. [2246]).

4584. Така하시 Н., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 499 (1964).
Таблицы лоренцевых полей для кубической решетки.
4585. Тамашке О., App. Phys., 8, 76 (1961).
О математических основах квантовомеханической электронной теории бесконечной кристаллической решетки.
4586. Такака К., Тапима С., Fukuroi T., Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ., A13, 67 (1961). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Поперечный гальваномагнитный эффект в монокристалле висмута в сильном магнитном поле.
4587. Такака М., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 29, 675 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Влияние нелокальной корреляции на периодическое поле, антиэкранирование.
4588. Такака С., Kobayashi M., Hanamura E., Uchinokura K., Phys. Rev., 134, A256 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Микроволновое поглощение в кремнии при низких температурах.
4589. Такака С. (см. [2651, 2652]).
4590. Тапг С. Л., Phys. Rev., 134, A1166 (1964).
Когерентные рамановские эффекты высшего порядка.
4591. Тапи С., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 23, 1157 (1960).
Влияние электрон-решеточного взаимодействия на диамагнетизм Ландау.
4592. Таписакиси С., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 1181 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Рентгеновское исследование сегнетоэлектрического фазового перехода NaNO_2 .
4593. Тарасов Л. В., ФТТ, 3, 1431 (1961). (Гл. 8, § 1.)
Об экспериментальном определении спектра тепловых колебаний кристаллов произвольной симметрии с помощью однофононного некогерентного рассеяния холодных нейтронов.
4594. Таубер Г. Е., Canad. Journ. Phys., 36, 1308 (1958).
Обобщенный вариационный принцип для явлений переноса.
4595. Таубер Г. Е., Soffer L., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 138 (1959).
Явления переноса в полупроводниках с гофрированными изоэнергетическими поверхностями.
4596. Таубер Г. Е., Journ. Franklin Inst., 268, 175 (1959).
Вариационный принцип для явлений переноса.
4597. Таубер Г. Е., Journ. Phys. Chem. Solids, 23, 7 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Кинетические свойства германия и кремния.
4598. Таус Дж., Czech. Journ. Phys., 6, 108 (1956).
Электронные явления в полупроводниках при наличии градиента температуры.
4599. Таус Дж., Rev. Mod. Phys., 29, 308 (1957).
Генерация э. д. с. в полупроводниках с неравновесными концентрациями носителей заряда.
4600. Таус Дж., Czech. Journ. Phys., 7, 376 (1957).
Замечание к теории аномального термоэлектрического эффекта в полупроводниках.
4601. Таус Дж., в сборнике «Semiconductors and Phosphors» Brunswick, Germany, 1958, p. 486.
О происхождении электродвижущих сил в полупроводниках
4602. Таус Дж., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 219 (1959).
Электронная ударная ионизация в полупроводниках.
4603. Таус Дж., Antoposik E., Phys. Rev. Lett., 5, 253 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое наблюдение спин-орбитального взаимодействия в германии.

4604. Таус J., Abraham A., Journ. Phys. Chem. Solids, 20, 190 (1961). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое исследование зонной структуры сплавов Ge—Si.
4605. Таус J., Semicond. Conf., Exeter, 1962, London, 1962, p. 333. (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства полупроводников.
4606. Tavegnier J., Compt. Rend., 245, 2490 (1957).
Замечания к формуле Займана для теплопроводности кристаллов.
4707. Taylor J. C., Proc. Camb. Phil. Soc., 52, 693 (1956).
Взаимодействие электронов с фононами в адиабатическом приближении.
4608. Taylor L. H., Phys. Rev., 80, 919 (1950). (Гл. 3, § 11.)
Зависимость сопротивления германия от давления.
4609. Taylor L. H., Rollins F. R., Jr., Phys. Rev., 136, A591 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Исследование трехфононных взаимодействий с помощью ультразвука. I. Теория.
4610. Taylor L. H. (см. [4133]).
4611. Taylor P. L., Proc. Roy. Soc., A275, 200 (1963).
Уравнение Больцмана для электронов проводимости.
4612. Taylor P. L., Proc. Roy. Soc., A275, 209 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Время релаксации электронов проводимости в благородных металлах.
4613. Taylor P. L., Phys. Rev., 135, A1333 (1964).
Изменения электрического сопротивления, обусловленные некогерентным электрон-фононным рассеянием.
4614. Taylor W. J., Journ. Chem. Phys., 25, 721 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Распределение частот колебаний в кристалле, определенное с помощью фурье-разложения теплоемкости.
4615. Teitler S., Wallis R. F., Journ. Phys. Chem. Solids, 16, 71 (1960).
Замечание о статистике полупроводников.
4616. Teitler S. (см. [3808, 3811, 3812]).
4617. Tenez E., Arkiv Fys., 11, 247 (1956). (Гл. 8, § 5.)
К вопросу о расчете характеристических температур кубических кристаллов по данным об упругих постоянных.
4618. Tenez E., Arkiv Fys., 12, 277 (1957). (Гл. 8, § 5.)
О расчете колебаний решетки в KCl.
4619. Tenez E. (см. [3368]).
4620. Ter Haar D., Rev. Mod. Phys., 27, 289 (1955).
Основы статистической механики.
4621. Ter Haar D., Physica, 22, 61 (1956).
О кинетических свойствах металлов и полупроводников.
4622. Ter Haar D., Neaves A., Adv. Phys., 5, 241 (1956).
О теплопроводности и термо-э. д. с. полупроводников.
4623. Ter Haar D., Rep. Progr. Phys., 20, 130 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Теории коллективных движений.
4624. Ter Haar D., Contemp. Phys., 1, 112 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Некоторые последние успехи теории многих тел.
4625. Ter Haar D., Rep. Progr. Phys., 24, 304 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Матрица плотности.
4626. Ter Haar D. (см. [1607, 1603]).
4627. Tessman J. R., Phys. Rev., 83, 677 (1951). (Гл. 4, § 4.)
Поправка Лоренца для гексагонального титаната бария.
4628. Tessman J. R., Kahn A. H., Shockley W., Phys. Rev., 92, 890 (1953). (Гл. 4, § 4.)
Электронные поляризуемости ионов в кристаллах.

4629. Testardi L. Y., Stiles P. J., Burstein E., *Solid State Commun.*, **1**, 28 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Исследования структуры валентной зоны Bi_2Te_3 с помощью эффекта де Гааза — ван Альфена и гальваномагнитных эффектов в сильных полях.
4630. Teutsch W. B., Love W. F., *Phys. Rev.*, **105**, 487 (1957). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла и сопротивление разбавленных золото-хромовых сплавов при низких температурах.
4631. Thomas D. G., Gershenzon M., Trumbore F. A., *Phys. Rev.*, **133**, A269 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Спектры пар и «краевое» излучение в фосфорноокислом галии.
4632. Thompson J. H. C., *Phil. Mag.*, **44**, 131 (1953).
Неустойчивость и плавление щелочногалогидных кристаллов.
4633. Thorson A. C., Berlincourt T. G., *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 617 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в калии.
4634. Thorson A. C., Berlincourt T. G., *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 244 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в рении, ниобии и тантале.
4635. Thorson A. C., Berlincourt T. G., *Nature*, **192**, 959 (1961). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в InBi .
4636. Thorson A. C., Joseph A. S., *Phys. Rev.*, **131**, 2078 (1963). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза — ван Альфена в цирконии.
4637. Thorson A. C. (см. [2728—2731]).
4638. Thorson W. R., *Jour. Chem. Phys.*, **29**, 938 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Запрещенное инфракрасное поглощение, стимулированное электронно-колебательным взаимодействием.
4639. Thuillier J. M., *Compt. Rend.*, **241**, 1121 (1955); **242**, 2633 (1956).
Теплопроводность полупроводников.
4640. Thuillier J. M. (см. [930, 4094]).
4641. Thurston R. N., Brugger K., *Phys. Rev.*, **133**, A1604 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Упругие постоянные третьего порядка и скорость упругих волн малой амплитуды в однородно напряженных средах.
4642. Tidman D. A., *Nuovo Simonto*, **3**, 503 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория показателя преломления, эффект Черенкова и ионизационные потери.
4643. Tidman D. A., *Nucl. Phys.*, **2**, 289 (1956). (Гл. 5, § 5.)
Квантовая теория показателя преломления, эффект Черенкова и потери энергии быстрой заряженной частицы.
4644. Tierstep M., *Jour. Phys. Chem. Solids*, **25**, 1151 (1964).
Подвижность дырок в полупроводниках типа алмаза при рассеянии на акустических модах колебания.
4645. Tinkham M., *Phys. Rev.*, **101**, 902 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в висмуте.
4646. Tippins H. H., Brown F. C., *Phys. Rev.*, **129**, 2554 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнетосопротивление AgBr .
4647. Tobin M. C., *Jour. Chem. Phys.*, **23**, 891 (1955).
Правила отбора для нормальных колебаний молекулярных цепочек.
4648. Tobin M. C., *Jour. Mol. Spectry*, **4**, 349 (1960).
Неприводимые представления, симметричные координаты и секулярное уравнение для линейных групп.

4649. Tobin M. C., *Journ. Chem. Phys.*, **35**, 1905 (1961).
Молекулярные орбиты для длинных полиэновых цепочек, полученные по методу ЛКАО, модифицированному с учетом условий симметрии.
4650. Tobo Stan W., *Phys. Rev.*, **107**, 203 (1957). (Гл. 11, § 6 и 7.)
Теория возмущений в задаче многих частиц.
4651. Toda M., *Journ. Phys. Soc. Jap.*, **8**, 339 (1953).
Диффузия на поверхности Ферми и проводимость металлов.
4652. Толпыго К. Б., Федорченко А. М., *ЖЭТФ*, **31**, 845 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Взаимодействие электронов и дырок с колебаниями решетки в гомеоплярном кристалле.
4653. Толпыго К. Б., Заславская И. Х., *Укр. физич. журн.*, **1**, 226 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Спектр натуральных осцилляций NaCl с учетом ионной деформации.
4654. Толпыго К. Б., *Укр. физич. журн.*, **2**, 242 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Микроскопическая теория электронных состояний в полярных кристаллах.
4655. Толпыго К. Б., *ФГТ*, **2**, 2655 (1960). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5.)
Оптические, упругие и пьезоэлектрические свойства ионных и валентных кристаллов с решеткой типа ZnS.
4656. Толпыго К. Б., *ФТТ*, **3**, 943 (1961). (Гл. 3, § 11; гл. 8, § 5.)
Дальнедействующие силы и уравнения динамики гомеоплярных кристаллов типа алмаза.
4657. Толпыго К. Б., *ФТТ*, **4**, 1765 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Исследование длинноволновых колебаний кристаллов типа алмаза с учетом дальнедействующих сил.
4658. Толпыго К. Б., Шека Д. И., *ФТТ*, **5**, 2609 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Спин-орбитальное расщепление дырочных зон в щелочногалогидных кристаллах.
4659. Толпыго К. Б., *ФТТ*, **6**, 741 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Волновые функции, нормировочные интегралы и средние заряды ионов для не вполне полярных кристаллов типа NaCl.
4660. Толпыго К. Б. (см. [1735, 1753, 1754, 1896, 2348, 2805, 3029, 3116, 3501, 3502]).
4661. Толстой Н. А., Шатилов А. В., *Оптика и спектроскопия*, **1**, 216 (1956).
Формальный анализ теории двухступенчатого возбуждения фосфоресценции и фотопроводимости. I. Стационарные зависимости.
4662. Тулуб А. В., *ЖЭТФ*, **36**, 565 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Влияние взаимодействия электрона с колебаниями кристаллической решетки на частоту циклотронного резонанса.
4663. Tomoaga S., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, **5**, 544 (1950). (Гл. 11, § 7.)
О применении метода звуковых волн Блоха в задаче многих тел.
4664. Tombs G. A., *Proc. Phys. Soc.*, **84**, 451 (1964).
К теории электронной проводимости.
4665. Tosi M. P., Fumi F. G., *Nuovo Cimento*, **7**, 95 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Взаимодействие между равновесными дефектами в щелочногалогидных кристаллах. Энергия связи «основного состояния» пары вакансий.
4666. Tosi M. P., Arnoldi G., *Nuovo Cimento*, **8**, 584 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Взаимодействие между равновесными дефектами в щелочногалогидных кристаллах. Энергия связи «первого возбужденного состояния» примесного комплекса и пары вакансий.
4667. Tosi M. P., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 965 (1963). (Гл. 10, § 4.)
Энергия связи щелочногалогидных кристаллов.

4668. Tosi M. P., Fumi F. G., Journ. Phys. Chem. Solids, 25, 45 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Размеры ионов и борновские параметры отгалкивания в щелочно-галлоидных кристаллах типа NaCl. II. Обобщенная форма Хаггинса — Майера.
4669. Tosi M. P., Solid State Phys., 16, 1 (1964). (Гл. 10, § 4.)
Сцепление ионных твердых тел в модели Борна.
4670. Tosi M. P. (см. [2172—2176]).
4671. Tosima S., Quinn J. J., Lampert M. A., Phys. Rev., 137, A883 (1965). (Гл. 3, § 10.)
Влияние столкновений на тензор магнетопроводимости квантовой плазмы.
4672. Tosima S. (см. [2510]).
4673. Товстюк К. Д., Берче Д. М., ФТТ, 6, 662 (1964).
Симметрия зон в кристаллах $D_{2h}^1 - D_{2h}^1$, $D_2^1 - D_2^1$, $C_{2v}^1 - C_{2v}^{10}$.
4674. Товстюк К. Д. (см. [4190]).
4675. Тохен А. М., Tausal S., Phys. Rev., 137, A211 (1965). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Гигантские осцилляции магнетоакустического затухания в Bi.
4676. Тохен А. М. (см. [3319]).
4677. Тоуа Т., Journ. Res. Inst. Catalysis Hokkaido Univ., 9, 178 (1961). (Гл. 8, § 5.)
Колебания решетки и тепловое расширение одновалентных металлов.
4678. Tredgold R. H., Proc. Phys. Soc., A67, 217 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Об обменном взаимодействии в приближении коллективизированных электронов.
4679. Tredgold R. H., Phys. Rev., 105, 1421 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Матрица плотности и задача многих тел.
4680. Трубицын В. П., ФТТ, 2, 898 (1960). (Гл. 10, № 1.)
Уравнение состояния металлов по статистическому методу.
4681. Церцвадзе А. А., Чхартишвили Ю. В., Качлишвили З. С., ФТТ, 4, 1743 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Расчет ионной и атомной долей связи в кристаллах карбида кремния.
4682. Цидильковской И. М., ЖТФ, 28, 1371 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Адиабатические гальвано- и термомагнитные явления в полупроводниках. I. Примесные полупроводники.
3683. Цидильковской И. М. (см. [1134]).
4684. Tsuchida A., Ohno K., Journ. Chem. Phys., 39, 600 (1963).
Расчеты молекулы аммония методами «связанных орбит» и «модифицированных электронных пар».
4685. Tsuji M., Journ. Phys. Soc. Japan, 12, 828 (1957).
Электронный перенос в металлах.
4686. Tsuji M., Mem. Fac. Sci. Kyushu Univ., B2, 119 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Кинетические явления в одновалентных металлах.
4687. Tsuji M., Journ. Phys. Soc. Japan, 13, 133, 818, 979 (1958). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Термоэлектрические, гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в одновалентных металлах. II. Термо-э.д.с. анизотропных сред. III. Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в анизотропных средах.
4688. Tsuji M., Journ. Phys. Soc. Japan, 13, 426 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Кинетические явления в одновалентных металлах.
4689. Tsutsumi O., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 1290 (1964).
Гальваномагнитные эффекты теплых электронов в многодолинных полупроводниках.

4690. Цвирко Ю. А., Толмазина М. А., ФТТ, **3**, 1393 (1961). (Гл. 5, § 5.)
О граничных условиях для электромагнитных волн на поверхности оптически активных кристаллов.
4691. Tuskeg C. W., Senio P., Phys. Rev., **99**, 1777 (1955).
Эффекты рентгеновского рассеяния, обусловленные локальными статическими дефектами решетки.
4692. Тулуб А. В., ЖЭТФ, **34**, 1641 (1958).
Фононное взаимодействие электронов в полярных кристаллах.
4693. Турчин В. Ф., ЖЭТФ, **33**, 124 (1957).
Многофосные процессы в кристаллах.
4694. Турик А. В., ФТТ, **5**, 1213 (1963). (Гл. 8, § 5.)
К теории поляризации и гистерезиса сегнетоэлектриков.
4695. Тябликов С. В., ЖЭТФ, **21**, 377 (1951). (Гл. 11, № 7.)
Адиабатическая форма теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем.
4696. Тябликов С. В., Толмачев В. В., ЖЭТФ, **34**, 1254 (1958).
О взаимодействии электронов с колебаниями решетки.
4697. Тябликов С. В., ФТТ, **3**, 3445 (1961).
Метод функций Грина в теории адиабатического приближения.
4698. Тябликов С. В. (см. [1274]).
4699. Uchiyama Y., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **21**, 938 (1959).
Влияние межэлектронных столкновений на проводимость неполярных кристаллов.
4700. Ueda S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **26**, 45 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Парная корреляционная функция неидеального электронного газа высокой плотности.
4701. Уетига Я., Иноэ М., Journ. Phys. Soc. Japan, **13**, 377 (1958).
Изменение концентрации носителей в простых полупроводниках в статическом магнитном поле.
4702. Уетига Я. (см. [2657, 2658, 3760]).
4703. Уханов Ю. И., ФТТ, **4**, 2741 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Фарадея в инфракрасной области длин волн в кремнии.
4704. Умаров С. У., Гурвич Л. Г., ЖТФ, **26**, 2179 (1956).
К теории контакта металл—полупроводник.
4705. Umeda J., Journ. Phys. Soc. Japan, **19**, 2052 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Гальваномагнитные эффекты в Mg_2Sn .
4706. Umeda K., Kobayashi S., Journ. Phys. Soc. Japan, **13**, 148 (1958). (Гл. 10, § 1.)
Функция Томаса — Ферми для примесного атома, введенного в матрицу металла.
4707. Упал В. С., Chevalier A., Kahan T., Compt. Rend., **246**, 901 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Квантовая теория эффекта Фарадея на атомах хрома для сантиметровых длин волн и ее экспериментальная проверка.
4708. Упо R., Journ. Phys. Soc. Japan, **18**, 739 (1963)
Структурные и температурные факторы NiO.
4709. Usui T., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), **23**, 787 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Возбуждения в электронном газе высокой плотности. I.
4710. Usui T. (см. [2158]).
4711. Walatin J. G., Physica, **24**, S. 136 (1958). (Гл. 11, § 7.)
О параллельном рассмотрении коллективного поведения фермионной и бозонной систем.
4712. Van Виегел Н. Г., Philips Res. Rep., **12**, 1, 190 (1957).
Влияние дефектов решетки на электрические свойства металлов, подвергнутых холодной обработке.

4713. Van Daal H. J., Knippenberg W. F., Wasscher J. D., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **24**, 109 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Об электронной проводимости кристаллов α —SiC в интервале от 300 до 1500° К.
4714. Van den Beukel A., *Appl. Sci. Res.*, **B5**, 459 (1956).
К теории акусто-электрического эффекта.
4715. Van der Leeden P., *Physica*, **21**, 743 (1955). (Гл. 8, § 5.)
О критических точках.
4716. Van der Pauw L. J., Polder D., *Journ. Electron.*, **8**, 239 (1956).
Фототермоэлектрические явления в полупроводниках.
4717. Van Hove L., *Phys. Rev.*, **89**, 1189 (1953). (Гл. 8, § 5.)
Наличие сингулярностей в распределении частот упругих колебаний кристалла.
4718. Van Hove L., *Phys. Rev.*, **95**, 249 (1954). (Гл. 11, § 7.)
Пространственно-временные корреляции и рассеяние в борновском приближении в системах взаимодействующих частиц.
4719. Van Hove L., *Physica*, **21**, 901 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Поправки к энергии, вызываемые постоянно действующими возмущениями в системах с непрерывным спектром.
(См. перевод в сборнике «Вопросы квантовой теории многих тел», ИЛ, 1959, стр. 115.)
4720. Van Hove L., *Physica*, **23**, 441 (1957).
Приближение к равновесию в квантовой статистике.
4721. Van Hove L., *Physica*, **24**, 404 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Замечание о зависящей от времени парной функции корреляции.
4722. Van Hove L., *Ned. Tijdschr. Natuurk.*, **25**, 227 (1959). (Гл. 10, § 6, гл. 11, § 7.)
Проблемы теории многих частиц.
4723. Van Hove L. (см. [3958]).
4724. Van Kampen N. G., *Physica*, **23**, 641 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Дисперсионное уравнение для плазменных волн.
4725. Van Kampen N. G., *Physica*, **23**, 825 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Теория индуцированного поглощения в инфракрасной области.
4726. Van Kampen N. G., *Physica*, **24**, 347 (1958). (Гл. 5, § 5.)
Индуцированное поглощение в инфракрасной области в газах. Расчет бинарных коэффициентов поглощения симметричных двухатомных молекул.
4727. Van Roosbroeck W., *Phys. Rev.*, **101**, 1714 (1956).
Теория фотомагнетоэлектрического эффекта в полупроводниках.
4728. Van Vliet K. M., *Physica*, **23**, 248 (1957).
Об эквивалентности метода Фоккера—Планка и метода свободной энергии для расчета флуктуаций концентрации носителей в полупроводниках.
4729. Varley J. H. O., *Proc. Roy. Soc.*, **A237**, 413 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Тепловое расширение чистых металлов и возможность отрицательных коэффициентов объемного расширения.
4730. Vasileff H. D., *Phys. Rev.*, **105**, 441 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Собственная энергия электронов и температурная зависимость эффективных масс в полупроводниках.
4731. Вавилов В. С., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **8**, 223 (1959). (Гл. 3, § 11.)
О фотоионизации и ионизации быстрыми электронами в германии и кремнии.
4732. Вавилов В. С., Брицын К. И., *ФТТ*, **2**, 1937 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Влияние сильного электрического поля на поглощение света кремнием.

4733. Вавилов В. С. (см. [4373]).
4734. Veelken R., Zs. Phys., 142, 476, 544 (1955). (Гл. 3, § 11.)
К теории электрических переходов в щелочногалогидных кристаллах. I. Потенциал обменного взаимодействия между быстрыми электронами и колебаниями решетки в полярных кристаллах. II. Расчет затухания электронов, численные результаты.
4735. Velasco M., Caput M. L., Amoros J. L., Publ. Dept. Crist. Min. (Madrid), 1, 157, 165 (1954). (Гл. 8, § 1.)
Исследования динамики решетки молекулярных кристаллов. I. Диффузное рассеяние в щавелевой кислоте. II. Диффузное рассеяние в адипиновой кислоте.
4736. Веркин Б. И., Дмитриенко И. М., Лазарев Б. Г., ЖЭТФ, 31, 53 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Влияние всестороннего сжатия на магнитные свойства монокристаллов висмута при низких температурах.
4737. Веркин Б. И., ЖЭТФ, 32, 156 (1957).
К вопросу о температурной зависимости магнитной восприимчивости элементов.
4738. Verwey E. J. W., в книге «Semi-conducting Materials», London, 1951, p. 151. (Гл. 3, § 11.)
Оксидные полупроводники.
4739. Vieland L. J., Kudman I., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 437 (1963).
Поведение селена в арсениде галлия.
4740. Viervoll H., Ogrim O., Acta Cryst., 2, 277 (1949). (Гл. 6, § 2.)
Расширенная таблица атомных факторов рассеяния.
4741. Винецкий В. Л., Гитерман М. Ш., ЖЭТФ, 33, 730 (1957). (Гл. 5, § 5.)
К теории взаимодействия «лишних» зарядов в ионных кристаллах.
4742. Винецкий В. Л., ЖЭТФ, 33, 780 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Оптические свойства F -центров.
4743. Винецкий В. Л., Дейген М. Ф., ЖЭТФ, 35, 287 (1958).
О влиянии акустических колебаний на параметры полос примесного поглощения в кристаллах.
4744. Винецкий В. Л., ФТТ, 2, 2544 (1960).
О пикчайшем квантовом состоянии носителей тока и центров окраски в ионных и атомарных кристаллах.
4745. Винецкий В. Л. (см. [1733, 1734]).
4746. Vineyard G. H., Phys. Rev., 110, 999 (1958). (Гл. 8, § 1.)
Рассеяние медленных нейтронов в жидкости.
4747. Виноградов В. С., ФТТ, 2, 2622 (1960).
Влияние нарушения периодичности кристаллической решетки по заряду на диэлектрические потери в области сверхвысоких частот.
4748. Виноградов В. С., ФТТ, 4, 712 (1962).
Применение метода функций Грина к расчету инфракрасного поглощения в ионных кристаллах.
4749. Виолина Г. Н., Елян-сю, Хобянов Г. Ф., ФТТ, 5, 3406 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Оптическое поглощение и электрические свойства α -SiC n -типа.
4750. Visscher W. M., Phys. Rev., 129, 28 (1963).
Резонансное поглощение γ -квантов примесными ядрами в кристаллах.
4751. Visscher W. M., Phys. Rev., 134, A965 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Локальные колебания в ангармоническом кристалле.
4752. Visscher W. M. (см. [1404]).
4753. Волошинский А., Кобелев Л., Физ. мет. и металловед., 6, 356 (1958). (Гл. 11, § 7.)
О дисперсионном соотношении для электронной плазмы,

4754. Волошинский А., Физ. мет. и металловед., 7, 655 (1959).
Применение функций Грина к квантовой теории электропроводности металлов.
4755. Вольский Е. П., ЖЭТФ, 43, 1120 (1962). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Квантовые осцилляции квазистатической проводимости висмута в магнитном поле.
4756. Volz H., Haken H., Zs. Phys. Chem. (Leipzig), 198, 61 (1951). (Гл. 11, § 7.)
К квантовой трактовке многоэлектронной задачи в твердом теле.
4757. Von Batchelder F. W., Rauechle R. F., Phys. Rev., 105, 59 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Постоянные решетки и перекрытие зон Бриллюэна в разбавленных сплавах магния.
4758. Von Laue M., Monatsber. Deut. Akad. Wiss. Berlin, 1, 159 (1959).
Поля рентгеновских волн в кристаллах.
4759. Von Roos O., Phys. Rev., 120, 1641 (1960).
Плазменная теория электрон-фононного взаимодействия в металлах.
4760. Вонсовский С. В., ЖТФ, 25, 2022 (1955). (Гл. 11, § 7.)
Некоторые вопросы многоэлектронной теории полупроводников.
4761. Вонсовский С. В., Кушниренко А. Н., Физ. мет. и металловед., 5, 395 (1957). (Гл. 11, § 7.)
Возбужденные состояния атомного полупроводника в многоэлектронной модели.
4762. Вонсовский С. В., Гитерман М. Ш., ФТТ, 2, 1793 (1960). (Гл. 11, § 7.)
К многоэлектронной теории ионных кристаллов.
4763. Вонсовский С. В., Талуц Г. С., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 30. (Гл. 11, § 7.)
Коллективные возбуждения электронных систем в полупроводниках в присутствии внешних полей.
4764. Воробьев А. А., ДАН СССР, 112, 53 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Преломление света в кристаллах и энергия связи между ионами.
4765. Вул Б. М., Сегал Б. И., ЖТФ, 28, 681 (1958).
К теории электронно-дырочных переходов в полупроводниках.
4766. Вятский А. Я., ФТТ, 2, 122 (1960).
К теории неупругого рассеяния электронов в твердом теле.
4767. Вятский А. Я., Махов А. Ф., ФТТ, 2, 887 (1960).
Поглощение и пробеги электронов в твердом теле.
4768. Wagner E. H., Zs. Phys., 141, 604, 622 (1955); 143, 249, 412 (1955). (Гл. 8, § 1.)
Дифракция параллельных пучков света на бегущих ультразвуковых волнах. I, II, III. Строгое решение задачи дифракции для расходящихся пучков света (цилиндрические волны). IV. Поле дифракции на большом расстоянии от кюветы при расходящемся первичном пучке.
4769. Wagner E. H., Acustica, 6, 17 (1956). (Гл. 8, § 1.)
К брэгговскому отражению света от ультразвуковых волн.
4770. Wagner E. H., Zs. Phys., 154, 352 (1959). (Гл. 8, § 1.)
О групповой скорости, плотности потока энергии и плотности энергии в рентгеновской или световой оптике кристаллов.
4771. Wagner H., Zs. Phys., 146, 127 (1956).
Аномальное ослабление рентгеновских лучей в случае брэгговского отражения.
4772. Wakoh S., Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, 19, 1342 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Ферми-поверхность никеля.

4773. W a k o h S. (см. [4898]).
4774. W a l k e r C. B., Phys. Rev., 103, 547 (1956). (Гл. 8, § 1.)
Рентгеновское исследование колебаний решетки алюминия.
4775. W a l k e r C. B., Phys. Rev. 103, 558 (1956). (Гл. 8, § 1.)
Рентгеновское комptonовское рассеяние в алюминии.
4776. W a l k e r W. C., Rusgi O. P., Weissler G. L., Journ. Opt. Soc. Amer., 48, 1017 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Прохождение света через испаренные пленки Ip, Sp и Bi в вакуумной ультрафиолетовой области.
4777. W a l k e r W. C., Journ. Phys. Chem. Solids, 24, 1667 (1963).
Переходы в *d*-зоне в твердых телах.
4778. W a l k e r W. C., Osantowski J., Phys. Rev., 134, A153 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства алмаза в ультрафиолетовой области.
4779. W a l l a c e D. C., Phys. Rev., 133, A153 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Вклад в свободную энергию кристаллов за счет ангармонизма при низких температурах и при абсолютном нуле.
4780. W a l l a c e D. C., Patrick J. L., Phys. Rev., 137, A152 (1965). (Гл. 10, § 4.)
Устойчивость кристаллических решеток.
4781. W a l l e r I., Lundqvist S. O., Arkiv Fys., 7, 121 (1953).
Некоторые замечания о роли перекрытия в рассеянии рентгеновских лучей в кристаллах.
4782. W a l l i n g J. C., Bunn P. B., Proc. Phys. Soc., 74, 417 (1959).
Электронные теплоемкости некоторых никелево-кобальтовых сплавов.
4783. W a l l i s R. F., Phys. Rev., 105, 540 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Влияние свободных концов на частоты колебаний одномерных решеток.
4784. W a l l i s R. F., Journ. Phys. Chem. Solids, 4, 101 (1958). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Теория циклотронного резонансного поглощения на электронах проводимости в антимониде индия.
4785. W a l l i s R. F., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 78 (1958).
Теория фотоионизации примесей в полупроводниках в магнитном поле.
4786. W a l l i s R. F., Phys. Rev., 116, 302 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Теория поверхностных ветвей колебаний в двух- и трехмерных кристаллических решетках.
4787. W a l l i s R. F., Bowlden H. J., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 318, 336 (1959).
Теория эффекта Зеемана при фотоионизации примесей.
4788. W a l l i s R. F., Bowlden H. J., Phys. Rev., 118, 456 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Структура валентной зоны Ge во внешнем магнитном поле.
4789. W a l l i s R. F., Magadudin A. A., Phys. Rev., 125, 1277 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Ангармонизм решетки и оптическое поглощение в полярных кристаллах. III. Квантовомеханическая трактовка в линейном приближении.
4790. W a l l i s R. F. (см. [1461, 1463—1466, 1565, 3587, 3808—3812, 4615]).
4791. W a l n u t T. H., Journ. Chem. Phys., 26, 10 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Теоретическое исследование распределений колебательных частот для молекулярных кристаллов со структурой диангистого иода.
4792. W a l n u t T. H., Journ. Chem. Phys., 31, 361 (1959). (Гл. 8, § 1.)
Об использовании волновых функций гармонического осциллятора при описании ангармонических кристаллов.

4793. Walput T. H., Journ. Chem. Phys., 31, 1468 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Применение метода самосогласованного поля для описания колебательных кристаллов.
4794. Walsh W. M., Jr., Fawcett E., Ampere Colloq., Eindhoven, 1962, p. 514. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в вольфраме.
4795. Walsh W. M. (см. [2024]).
4796. Walton A. K., Moss T. S., Ellis B., Proc. Phys. Soc., 79, 1065 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Определение эффективной массы электронов в солях свинца с помощью эффекта Фарадея в инфракрасной области.
4797. Walton A. K., Moss T. S., Proc. Phys. Soc., 81, 509 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Определение показателя преломления и поправки к эффективной массе электронов в PbTe и PbSe.
4798. Walton A. K. (см. [3653, 3654]).
4799. Wang C. C., Spinar L. H., Journ. Phys. Chem Solids, 24, 953 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронный перенос в соединениях типа $A^{III}B^V$ со структурой цинковой обманки.
4800. Wang S., Wallis G., Phys. Rev., 107, 947 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Центры рекомбинации и быстрые состояния на нестабильной поверхности германия.
4801. Wang S., Phys. Rev., 132, 573 (1963).
Метод расчета энергетических уровней захваченных электронов в ионных кристаллах.
4802. Wannier G. H., Phys. Rev., 117, 432 (1960).
Волновые функции и эффективный гамильтониан для блоховских электронов в электрическом поле.
4803. Wannier G. H., Fredkin D. R., Phys. Rev., 125, 1910 (1962).
Расщепление блоховских зон в однородных полях.
4804. Wannier G. H., Rev. Mod. Phys., 34, 645 (1962).
Динамика зонных электронов в электрических и магнитных полях.
4805. Wannier G. H. (см. [1563]).
4806. Waser J., Acta Cryst., 8, 731 (1955).
Анизотропный температурный фактор в триклинных координатах.
4807. Watabe M., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 29, 519 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Влияние кулоновской корреляции на различные свойства металлов.
4808. Watabe M. (см. [2774]).
4809. Wei W. F., Love W. F., Semicond. Phys. Conf., Prague, 1960, New York, 1961, p. 163 (Гл. 3, § 10 и 11.)
Продольное магнетосопротивление германия n -типа в сильном магнитном поле.
4810. Weigner D., Phys. Rev., 125, 1226 (1962). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Эффект де Гааза—ван Альфена в сплавах Bi—Te.
4811. Weinreich G., Phys. Rev., 107, 317 (1957). (Гл. 3, § 9 и 11.)
Затухание ультразвука на свободных носителях в германии.
4812. Weinreich G., Boyle W. S., White H. G., Rodgers K. F., Phys. Rev. Lett., 2, 96 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Расщепление основного состояния донора-мышьяка в германии вследствие наличия многих минимумов.
4813. Weiss G., Bull. Res. Council Israel, 7F, 165 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Замечания о колебательных свойствах одномерных ионных решеток.
4814. Weiss G., Magarudin A., Journ. Phys. Chem. Solids, 7, 327 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Термодинамические свойства неупорядоченной решетки.

4815. Weiss G., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)*, **22**, 526 (1959). (Гл. 8, § 5.)
Об обращении функции удельной теплоемкости.
4816. Weiss G. (см. [1822, 1823, 2256, 3467, 3468, 3470]).
4817. Weiss R. J., DeMarco J. J., Weremchuk G., Corliss L., Hastings J., *Acta Cryst.*, **9**, 42 (1956).
Кажущаяся анизотропия фактора Дебая—Уоллера в кубических кристаллах.
4818. Weiss R. J. (см. [1749, 3831]).
4819. Wentzel G., *Phys. Rev.*, **83**, 168 (1951).
Взаимодействие колебаний решетки с электронами в металле.
4820. Wentzel G., *Phys. Rev.*, **108**, 1593 (1957).
Диамagnetизм плотного электронного газа.
4821. Wernick J. H., Geller S., Benson K. E., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **4**, 154 (1958).
Новые полупроводники.
4822. Whelan M. J., Hirsch P. B., *Phil. Mag.*, **2**, 1121, 1303 (1957).
Дифракция электронов в кристаллах с дефектами упаковки.
4823. White G. K., Woods S. B., *Canad. Journ. Phys.*, **35**, 248 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Теплопроводность и электропроводность родия, иридия и платины.
4824. White G. K., Woods S. B., *Canad. Journ. Phys.*, **35**, 655 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Сопротивление переходных элементов — кобальта, вольфрама и рения — при низких температурах.
4825. White G. K., Woods S. B., *Phil. Mag.*, **3**, 342 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Тепловое и электрическое сопротивления висмута и сурьмы при низких температурах.
4826. White G. K. (см. [2477, 2853]).
4827. White H. C., *Phys. Rev.*, **112**, 1092 (1958). (Гл. 8, § 5.)
Атомные силовые константы меди по теореме Фейнмана.
4828. Whitfield D. G., *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 204 (1959).
Теория электрон-фононных взаимодействий.
4829. Whittsett C. R., *Phys. Rev.*, **138**, A829 (1965). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Осцилляции магнетосопротивления селенида ртути.
4830. Wieder H. H., *Journ. Appl. Phys.*, **26**, 1479 (1955). (Гл. 8, § 5.)
Сегнетоэлектрический гистерезис в монокристаллах титаната бария.
4831. Willard H. J., *Phys. Rev.*, **76**, 565 (1949). (Гл. 8, § 5.)
Обобщение теории Мэзона и Матисса на случай низкотемпературного перехода в BaTiO_3 .
4832. Williams F. E., *Journ. Chem. Phys.*, **19**, 457 (1951). (Гл. 5, § 5.)
Абсолютная теория люминесценции в твердых телах.
4833. Williams F. E., Segal B., Johnson P. D., *Phys. Rev.*, **108**, 46 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Силы осцилляторов для излучательных переходов в KCl:Te и KCl:In .
4834. Williams F. E., *Journ. Opt. Soc. Amer.*, **47**, 869 (1957). (Гл. 5, § 5.)
Природа центров свечения в щелочногалогидных цинк-сульфидных фосфорах.
4835. Williams F. E., Johnson P. D., *Phys. Rev.*, **113**, 97 (1959). (Гл. 3, § 11; гл. 5, § 5.)
Конфигурационная координатная модель KCl:Ti с учетом спин-орбитального взаимодействия.
4836. Williams F. E., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **12**, 265 (1960). (Гл. 5, § 5.)
Теория энергетических уровней донорно-акцепторных пар.
4837. Williams F. E. (см. [3994—3996]).

4838. Williams R. C., Herman F., *Semicond. Phys. Conf. Prague, 1960, New York, 1961*, p. 599. (Гл. 3, § 8.)
Циклотронный резонанс при неравновесных распределениях носителей заряда.
4839. Williams R. C. (см. [1850, 1851]).
4840. Williams S. J., Foner S., Smith R. A., *Phys. Rev.*, **136**, A1065 (1964). (Гл. 3, § 9.)
Влияние уширения уровней Ландау на эффект де Гааза — ван Альфена.
4841. Wilson A. H., *Proc. Cambr. Phil. Soc.*, **49**, 292 (1953).
Диамagnetизм квазисвязанных электронов проводимости.
4842. Wilson A. H., *Physica*, **24**, S98 (1958).
Явления переноса в металлах.
4843. Wilson A. H. (см. [4402]).
4844. Wilson C. B., *Proc. Phys. Soc.*, **76**, 481 (1960). (Гл. 5, § 3.)
Феноменологическая теория характеристических энергетических потерь быстрых электронов в металлах.
4845. Winston H., *Phys. Rev.*, **94**, 328 (1954).
Исследование локализованных орбит.
4846. Wiser N., *Phys. Rev.*, **129**, 62 (1963).
Диэлектрическая проницаемость с учетом эффекта локального поля.
4847. Wiser N., *Phys. Rev.*, **138**, A452 (1965).
Кристаллические структуры простых металлов; роль корреляции обмена.
4848. Wohlfarth E. P., *Phys. Rev.*, **74**, 984 (1948).
Аномальные значения константы термоионной эмиссии.
4849. Wohlfarth E. P., *Proc. Phys. Soc.*, **60**, 360 (1948).
Константы термоионной эмиссии и перекрытие зон.
4850. Wojciechowski K. F., *Acta Phys. Polon.*, **22**, 293 (1962).
Энергия Ферми свободных электронов и размерный эффект.
4851. Wojciechowski K. F., *Bull. Acad. Polon. Sci. Ser. Sci. Math. Astron. Phys.*, **11**, 125 (1963). (Гл. 5, § 1.)
Размерный эффект в газе свободных электронов.
4852. Wolff P. A., *Phys. Rev.*, **92**, 18 (1953). (Гл. 11, § 7.)
Теория плазменных волн в металлах.
4853. Wolff P. A., *Phys. Rev.*, **112**, 66 (1958). (Гл. 11, § 7.)
Теория плазменного резонанса в твердых телах.
4854. Wolff P. A., *Phys. Rev.*, **116**, 544 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Влияние электронной корреляции на оптические свойства металлов.
4855. Wolff P. A., *Phys. Rev.*, **124**, 1030 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Локализованные моменты в металлах.
4856. Wolff P. A., *Phys. Rev.*, **132**, 2017 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Влияние корреляции на высокочастотную проводимость электронного газа.
4857. Wolff P. A., *Journ. Phys. Chem. Solids*, **25**, 1057 (1964).
Матричные элементы и правила отбора для двухзонной модели висмута.
4858. Wolfram T., Lehman G. W., DeWames R. E., *Phys. Rev.*, **129**, 2483 (1963). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки белого олова.
4859. Wolfram T. (см. [1770, 3249]).
4860. Woll E. J., Jr., Kohn W., *Phys. Rev.*, **126**, 1693 (1962). (Гл. 11, § 7.)
Образ поверхности Ферми в фононных спектрах металлов.
4861. Woodruff T. O., Ehrenreich H., *Phys. Rev.*, **123**, 1553 (1961). (Гл. 3, § 9.)
Поглощение звука в изоляторах.

4862. Woodruff T. O., Phys. Rev., 132, 679 (1963).
Взаимодействие волн тока и поляризации.
4863. Woodruff T. O. (см. [1527, 2747]).
4864. Woods A. D. B., Cochran W., Brockhouse B. N., Phys. Rev., 119, 980 (1960). (Гл. 8, § 2 и 5; гл. 9, § 5.)
Динамика решеток щелочногалонидных кристаллов.
4865. Woods A. D. B., Brockhouse B. N., March R. H., Stewart A. T., Bowers R., Phys. Rev., 128, 1112 (1962). (Гл. 8, § 2 и 5; гл. 9, § 5.)
Динамика кристалла Na при 90° К.
4866. Woods A. D. B., Brockhouse B. N., March R. H., Stewart A. T., Bowers R., Proc. Phys. Soc., 79, 440 (1962). (Гл. 8, § 2 и 5; гл. 9, § 5.)
Нормальные колебания натрия
4867. Woods A. D. B., Cochran W., Cowley R. A., Brockhouse B. N., Phys. Rev., 131, 1025 (1963). (Гл. 8, § 5; гл. 9, § 5.)
Динамика решеток щелочногалонидных кристаллов. II. Экспериментальное изучение KBr и NaI.
4868. Woods A. D. B., Phys. Rev., 136, A781 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Динамика решетки тантала.
4869. Woods A. D. B. (см. [1232, 1379, 1381, 1658, 1811]).
4870. Woods J. F., Phys. Rev., 106, 235 (1957). (Гл. 3, § 11.)
Исследование фотопроводимости в пленках сульфида свинца с помощью измерений эффекта Холла и сопротивления.
4871. Wright D. A., Brit. Journ. Appl. Phys., 9, 205 (1958).
Фотопроводимость.
4872. Wright G. B., Lax V., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2113 (1961). (Гл. 3, § 8.)
Опыты по магнетоотражению в интерметаллических соединениях.
4873. Wright G. B. (см. [1798, 2473, 3197]).
4874. Wright R. W., Bastin J. A., Proc. Phys. Soc., 71, 109 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Характеристическая температура и эффективная масса электронов для процессов проводимости в окиси кадмия.
4875. Wu C. J., Phys. Rev., 138, A51 (1965).
Высокочастотная проводимость плазмы в условиях квазиравновесия. I. Формулировка общей теории.
4876. Yafet Y., Phys. Rev., 115, 1172 (1959).
Энергетические уровни электронов проводимости в магнитном поле.
4877. Яковлев В. А., ФТТ, 3, 1983 (1961).
К теории проводимости электронов узких зон полупроводников в сильном электрическом поле.
4878. Yamada E., Shogenji K., Journ. Phys. Soc. Japan, 16, 1475 (1961). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Замечание магнетосопротивлений PbTe в сильных магнитных полях.
4879. Yamagata K., Journ. Phys. Soc. Japan, 15, 2363 (1960).
Замечание к работе Дейта «Магнетоплазменный резонанс в полупроводниках. I».
4880. Yamaguchi S., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 266 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства серебряных пленок. Прямое наблюдение спектральной зависимости $\text{Im}(1/\epsilon)$.
4881. Yamaguchi T., Journ. Phys. Soc. Japan, 17, 1359 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Электронные состояния одиночных вакансий в алмазе.
4882. Yamaguchi T., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 368 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронные состояния одиночных атомов внедрения в алмазе.

4883. Yamamoto R., Ikeda M., Sato H., Journ. Phys. Soc. Japan, 20, 229 (1965). (Гл. 2, § 4; гл. 3, § 11.)
Эффект Холла в германии p -типа в сильном электрическом поле.
4884. Yamamoto T., Tani K., Okada K., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 15, 184 (1956).
О диссипации энергии электронов проводимости при упругом рассеянии на примесях.
4885. Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, 4, 310 (1949).
Теория термо-э. д. с. в полупроводниках.
4886. Yamashita J., Kojima M., Journ. Phys. Soc. Japan, 7, 261 (1952). (Гл. 3, § 11.)
Об электронных состояниях дважды заряженных отрицательных ионов кислорода в окисных кристаллах.
4887. Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, 7, 284 (1952). (Гл. 9, § 6; гл. 10, § 4.)
Квантовомеханический расчет энергии решетки и постоянной решетки кристалла LiF.
4888. Yamashita J., Watanabe M., Journ. Phys. Soc. Japan, 7, 334 (1952).
О проводимости неполярных кристаллов в сильном электростатическом поле.
4889. Yamashita J., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 8, 280 (1952); 12, 454 (1954). (Гл. 9, § 5.)
Теория диэлектрической проницаемости ионных кристаллов. I, II. Влияние температуры.
4890. Yamashita J., Kurosawa T., Journ. Phys. Soc. Japan, 10, 610 (1955). (Гл. 9, § 5.)
Теория диэлектрической проницаемости ионных кристаллов. III.
4891. Yamashita J., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 15, 95 (1956). (Гл. 3, § 11.)
Теория умножения электронов в кремнии.
4892. Yamashita J., Phys. Rev., 111, 733 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Кислородная зона в окиси магния.
4893. Yamashita J., Phys. Rev., 111, 1529 (1958).
Проводимость неполярных кристаллов в сильном электрическом поле. II.
4894. Yamashita J., Kurosawa T., Journ. Phys. Chem. Solids, 5, 34 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Об электронном токе в NiO.
4895. Yamashita J., Inoue K., Journ. Phys. Chem. Solids, 12, 1 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Горячие электроны в германии n -типа.
4896. Yamashita J., Kurosawa T., Journ. Phys. Soc. Japan, 15, 802 (1960).
Гейтлер-лондоновское приближение в теории электропроводности с приложением к задаче о проводимости, обусловленной d -электронами.
4897. Yamashita J., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2215 (1961).
Гейтлер-лондоновское приближение в теории электропроводности.
4898. Yamashita J., Fukuchi M., Wakoh S., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 999 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура никеля.
4899. Yamashita J., Journ. Phys. Soc. Japan, 18, 1010 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Электронная структура TiO и NiO.
4900. Yamashita J. (см. [2497, 3138, 4772]).
4901. Yanagawa S., Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 10, 83 (1953). (Гл. 8, § 5).
Теория нормальных колебаний в кристалле.

4902. Yaqub M., Cochran J. F., Phys. Rev. Lett., 10, 390 (1963). (Гл. 3, § 11.)
Зависимость сопротивления от тока в монокристаллах галлия малых размеров.
4903. Yoshimine M., Hurst R. P., Phys. Rev., 135, A612 (1964).
Дипольные поляризуемости атомов в приближении Хартри — Фока.
4904. Yoshitomi A., Kitano Y., Journ. Phys. Soc. Japan, 11, 352 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Теория колебаний решетки графита.
4905. Yoshinaga H., Oetjen R. A., Phys. Rev., 101, 526 (1956) (Гл. 3, § 11.)
Оптические свойства антимонида индия в интервале от 20 до 200 мк.
4906. Yoshizumi H., Adv. Chem. Phys., 2, 323 (1959). (Гл. 11, § 7.)
Проблема корреляции в квантовой механике многоэлектронных систем. II. Библиографический обзор исторического развития с комментариями.
4907. Yoshida K., Phys. Rev., 107, 396 (1957). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Аномальное электрическое сопротивление и магнетосопротивление, обусловленное $s-d$ -взаимодействием в сплавах Cu—Mn.
4908. Young J. A., Korperl J. U., Phys. Rev., 134, A1476 (1964). (Гл. 8, § 5.)
Спектры колебаний решетки бериллия, магния и цинка.
4909. Young R. C., Phil. Mag., 7, 2065 (1962). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Циклотронный резонанс в свинце при 36 000 Мгц.
4910. Young R. C. (см. [3423]).
4911. Young W. H., March N. H., Proc. Roy. Soc., A256, 62 (1960). (Гл. 11, § 7.)
Метод матрицы плотности в задаче о корреляции в однородном электронном газе.
4912. Young W. H., Phil. Mag., 6, 371 (1961). (Гл. 11, § 7.)
Вариационный метод в задаче о корреляции в электронном газе.
4913. Young W. H., Phys. Rev., 129, 2019 (1963). (Гл. 11, § 7.)
Динамическая и статическая корреляция в электронном газе.
4914. Задумкин С. Н., ФТТ, 2, 878 (1960). (Гл. 10, § 4.)
Приближенный расчет поверхностной энергии некоторых полупроводников со структурой алмаза и цинковой обманки.
4915. Zak J., Phys. Rev., 134, A1602, A1607 (1964).
Магнитная трансляционная группа. I, II. Неприводимые представления.
4916. Zak J., Phys. Rev., 136, A778 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Трактовка уширения уровней Ландау в кристаллах с помощью теории групп.
4917. Zak J., Phys. Rev., 136, A1647 (1964). (Гл. 3, § 8.)
Одномерное уравнение для двумерного блоховского электрона в магнитном поле.
4918. Zallen R., Paul W., Phys. Rev., 134, A1628 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Зонная структура фосфида галлия по оптическим данным при высоких давлениях.
4919. Заславская И. Г., Укр. физич. журн., 1, 366 (1956). (Гл. 8, § 5.)
Расчет теплоемкости кристалла NaCl.
4920. Заславская И. Г. (см. [4653]).
4921. Завадский Э. А., Коврижных Ю. Т., Факидов И. Г., ФТТ, 6, 173 (1964). (Гл. 3, § 11.)
Фотогальваномагнитные эффекты на германии в сильных магнитных полях.

4922. Завадский Э. А. (см. [1998]).
4923. Zebovni N. H., Hamburg R. E., Maskey H. J., Phys. Rev. Lett., 11, 260 (1963). (Гл. 3, § 10 и 11.)
Магнитоморфические осцилляции эффекта Холла и магнетосопротивление кадмия.
4924. Zebovni N. H. (см. [4041]).
4925. Zeiger H. J., Lax B., Dexter R. N., Phys. Rev., 105, 495 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Классическая кинетическая теория циклотронного резонанса для случая гофрированных поверхностей.
4926. Zeiger H. J., Rauch C. J., Behrndt M. E., Phys. Rev. Lett., 1, 5 (1958). (Гл. 3, § 8.)
Наблюдение микроволнового циклотронного резонанса с помощью кроссмодуляции.
4927. Zeiger H. J., Rauch C. J., Behrndt M. E., Journ. Phys. Chem. Solids, 8, 496 (1959). (Гл. 3, § 8.)
Кроссмодуляция сопротивления на постоянном токе при микроволновом циклотронном резонансе.
4928. Zeiger H. J. (см. [1786, 1790, 3193, 3194, 3199, 3201, 4052, 4496]).
4929. Zemel J. N., Petritz R. L., Phys. Rev., 110, 1263 (1958). (Гл. 3, § 11.)
Магнитные опыты с поверхностью германия.
4930. Zemel J. N., Phys. Rev., 112, 762 (1958).
Теория переноса по поверхности.
4931. Zemel J. N., (см. [3814]).
4932. Жданов Г. С., Соловьев С. П., Веневцев Ю. Н., Кристаллография, 2, 639 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Структурные коэффициенты внутреннего поля в сегнетоэлектриках со структурой типа перовскита.
4933. Жирнов В. А., ЖЭТФ, 35, 1175 (1958). (Гл. 8, § 5.)
К теории доменных стенок в сегнетоэлектриках.
4934. Жузе В. П., Сергеева В. М., Штрум Е. Л., ЖТФ, 28, 233 (1958).
Новые полупроводниковые соединения.
4935. Жузе В. П. (см. [1275]).
4936. Зигенлауб Р., ДАН СССР, 117, 395 (1957).
Расчет электропроводности полупроводника с высокой концентрацией примеси.
4937. Зильберман Г. Е., ЖЭТФ, 30, 1092 (1956).
Энергетический спектр электрона в кристалле в магнитном поле.
4938. Зильберман Г. Е., Ицкович Ф. И., ЖЭТФ, 32, 158 (1957).
Температурная зависимость магнитной восприимчивости электронов в металле.
4939. Зильберман Г. Е., ЖЭТФ, 32, 296 (1957).
Электрон в периодическом электрическом и однородном магнитном полях. I.
4940. Зильберман Г. Е., ЖЭТФ, 33, 387 (1957).
Электрон в периодическом электрическом и однородном магнитном полях. II.
4941. Зильберман Г. Е., Айзенберг Я. Е., Физ. мет. и металловед., 4, 216 (1957).
О возможной форме поверхности постоянной энергии электронов в периодическом поле решетки.
4942. Зильберман Г. Е., ЖЭТФ, 34, 243 (1958). (Гл. 3, § 9.)
К теории эффекта де Гааза — ван Альфена для открытых изоэнергетических поверхностей.

4943. Зильберман Г. Е., ЖЭТФ, 36, 1465 (1959).
К вопросу о движении электрона в кристалле во внешних полях.
4944. Зильберман Г. Е., ЖЭТФ, 37, 1452 (1959).
О зонном энергетическом спектре в присутствии магнитного поля.
4945. Зильберман Г. Е., Физ. мет. и металловед., 7, 504 (1959). (Гл. 3, § 9.)
Некоторые проблемы теории эффекта де Гааза — ван Альфена.
4946. Ziman J. M., Proc. Roy. Soc., A226, 436 (1954).
Электропроводность и теплопроводность одновалентных металлов.
4947. Ziman J. M., Proc. Camb. Phil. Mag., 51, 707 (1955).
Взаимодействие электронов с фононами в адиабатическом приближении.
4948. Ziman J. M., Phil. Mag., 1, 191 (1956).
Влияние свободных электронов на теплопроводность решетки.
4949. Ziman J. M., Canad. Journ. Phys., 34, 1256 (1956).
Общий вариационный принцип в теории явлений переноса.
4950. Ziman J. M., Nuovo Cimento, Suppl., 7, 353 (1958).
Кристаллические свойства твердых тел.
4951. Ziman J. M., Phil. Mag., 3, 1117 (1958). (Гл. 2, § 4.)
Гальваномагнитные свойства цилиндрических поверхностей Ферми.
4952. Ziman J. M., Proc. Roy. Soc., A252, 63 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Теория остаточного сопротивления меди.
4953. Ziman J. M., Phil. Mag., 4, 371 (1959). (Гл. 3, § 11.)
Термо-э. д. с. щелочных металлов при низких температурах.
4954. Ziman J. M., в книге «The Fermi Surface», New York, 1960, p. 296.
«Обычные» кинетические свойства и форма поверхности Ферми.
4955. Ziman J. M., Phil. Mag., 5, 757 (1960).
Замечание о правилах отбора для оптических переходов в сплавах.
4956. Ziman J. M., Adv. Phys., 10, 1 (1961).
Обычные кинетические свойства благородных металлов.
4957. Ziman J. M., Phil. Mag., 6, 1013 (1961).
Исследование электрических свойств жидких металлов. I. Одновалентные металлы.
4958. Ziman J. M., Phys. Rev., 121, 1320 (1961).
Приближенный расчет анизотропии времени релаксации электронов проводимости в благородных металлах.
4959. Ziman J. M., Contemp. Phys., 3, 241, 321 (1962).
Электроны в металлах; краткое введение в теорию поверхности Ферми. I. Электронный газ. II. Полосы и зоны.
4960. Ziman J. M., Adv. Phys., 13, 89 (1964).
Метод нейтральных псевдоатомов в теории металлов.
4961. Ziman J. M. (см. [1202, 1203, 1340, 1515, 3689, 3881, 4272]).
4962. Zimmegata J. E., Sato H., Journ. Phys. Chem. Solids, 21, 71 (1961). (Гл. 1, § 4.)
Электронная теплоемкость сплавов Мп—Си.
4963. Зорина Е. Л., ФТТ, 2, 1936 (1960).
Замечание к правилу Мозера и Пирсона.
4964. Зотова Н. В., Наследов Д. Н., ФТТ, 4, 681 (1962). (Гл. 3, § 11.)
Гальвано- и термомагнитные свойства арсенида индия р-типа.
4965. Звягина И. П., ФТТ, 5, 581 (1963).
К вопросу о положении уровня Ферми в сильно легированных полупроводниках.
4966. Звягина А. П., Иверонова В. И., Кристаллография, 2, 613 (1957). (Гл. 8, § 5.)
Метод определения амплитуд тепловых колебаний атомов разного сорта в твердом растворе.

4967. Звягина А. П., Иверонова В. И., ФТТ, 2, 118 (1960). (Гл. 8, § 5.)
Характеристическая температура и спектр тепловых колебаний решетки.
4968. Звягина А. П., Иверонова В. И., Изв. АН СССР, сер. физич., 26, 340 (1962). (Гл. 8, § 5.)
Спектр тепловых колебаний и характеристическая температура кристаллической решетки типа CsCl.
4969. Zwerdling S., Keyes R. J., Foner S., Kolm H. H., Lax B., Phys. Rev., 104, 1805 (1956). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Магнетозонные эффекты в InAs и InSb в постоянных и сильных импульсных магнитных полях.
4970. Zwerdling S., Lax B., Phys. Rev., 106, 51 (1957). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Осцилляции магнетопоглощения при прямых переходах в германии.
4971. Zwerdling S., Lax B., Roth L. M., Phys. Rev., 108, 1402 (1957). (Гл. 3, § 8.)
Осцилляции магнетосопротивления в полупроводниках.
4972. Zwerdling S., Roth L., Lax B., Journ. Phys. Chem. Solids., 8, 397 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Прямые и не прямые экситоны в германии.
4973. Zwerdling S., Lax B., Button K. J., Roth L. M., Journ. Phys. Chem. Solids, 9, 320 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Осцилляции магнетопоглощения в антимониде галлия.
4974. Zwerdling S., Lax B., Roth L. M., Button K. J., Phys. Rev., 114, 80 (1959). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Экситонное поглощение и магнетопоглощение при прямых и не прямых переходах в германии.
4975. Zwerdling S., Button K. J., Lax B., Phys. Rev., 118, 975 (1960). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Эффект Зеемана для примесных уровней в Si.
4976. Zwerdling S., Button K. J., Lax B., Roth L. M., Phys. Rev. Lett., 4, 173 (1960). (Гл. 3, § 11.)
Внутренние примесные уровни в полупроводниках; опыты на кремнии p -типа.
4977. Zwerdling S., Kleiner W. H., Theriault J. P., Journ. Appl. Phys., 32 (Suppl.), 2118 (1961). (Гл. 3, § 8 и 11.)
Осцилляции магнетопоглощения в InSb в условиях высокого разрешения.
4978. Zwerdling S., Kleiner W. H., Theriault J. P., Semicond. Conf. Exeter, 1962, London, 1962, p. 455. (Гл. 3, § 8 и 11.)
Магнетопоглощение в InSb; анизотропия валентной зоны. Измерения вдали от края поглощения.
4979. Zwerdling S. (см. [2861, 3196, 4160]).
4980. Zylberstejn A., Conwell E., Phys. Rev. Lett., 11, 417 (1963).
Возмущение распределения фононов в сильных электрических полях.
4981. Зырянов П. С., ЖЭТФ, 29, 193 (1955).
К теории электропроводности металлов.
4982. Зырянов П. С., ФТТ, 5, 3011 (1963).
Квантовая теория слабо неравновесных электрон-фононных систем в магнитном поле.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода	5
Предисловие	7
Глава 1. Теория электропроводности, приближение свободных электронов	
§ 1. Теория металлов по Друде — Лорентцу	13
§ 2. Свободные электроны	16
§ 3. Недостатки теории Друде — Лорентца	19
§ 4. Применение статистики Ферми — Дирака к электронам в металле	20
§ 5. Рассеяние электронов и электрическое сопротивление	25
§ 6. Статистика Ферми и проводимость металлов	32
Литература	35
Глава 2. Электропроводность металлов и полупроводников	36
§ 1. Электрон в периодическом поле решетки и внешнем электрическом поле	36
§ 2. Ускорение волнового пакета в электрическом поле	40
§ 3. Электропроводность металлов и полуметаллов	46
§ 4. Эффект Холла	53
§ 5. Полупроводники	57
Литература	66
Дополнительная литература	66
Глава 3. Циклотронный резонанс и связанные с ним эффекты	67
§ 1. Качественное описание природы циклотронного резонанса	67
§ 2. Задача о движении свободного электрона в магнитном поле. Метод Ландау	72
§ 3. Задача о движении свободного электрона в магнитном поле. Цилиндрические координаты	74
§ 4. Связь теоремы Онзагера с условием квантования	80
§ 5. Теорема Онзагера для периодического потенциала	82
§ 6. Циклотронная частота в случае эллипсоидальных поверхностей энергии	84
§ 7. Частота циклотронного резонанса для общего случая периодического потенциала	89
§ 8. Ограничения и возможности расширения метода циклотронного резонанса	90
§ 9. Эффект де Гааза — ван Альфена и связанные с ним опыты	94
§ 10. Поверхность Ферми для меди	98
§ 11. Библиография по электронным свойствам конкретных материалов	104
Литература	105
Дополнительная литература	106

Глава 4. Теории кристаллов-диэлектриков по Друде—Лорентцу и Эвальду	112
§ 1. Теория оптической дисперсии по Друде и Лорентцу	112
§ 2. Поправка Лорентца — Лоренца	117
§ 3. Теория поляризации диэлектрических кристаллов по Эвальду	120
§ 4. Теория дисперсии в изолирующих кристаллах	128
Литература	132
Глава 5. Теория оптических свойств металлов по Друде—Лорентцу	133
§ 1. Оптические свойства металла в модели свободных электронов	133
§ 2. Плазменные колебания	139
§ 3. Дальнейшее развитие теории плазменных колебаний	142
§ 4. Связанные электроны в металлах	146
§ 5. Библиография по оптическим свойствам кристаллов	151
Литература	152
Дополнительная литература	153
Глава 6. Теория дифракции рентгеновских лучей	154
§ 1. Элементарная теория рассеяния	154
§ 2. Атомный фактор и структурный множитель	159
§ 3. Динамическая теория дифракции рентгеновских лучей	162
§ 4. Вариант динамической теории, предложенный Лауэ	166
§ 5. Дифракция рентгеновских лучей в случае синусоидально меняющегося показателя преломления	170
§ 6. Рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами	176
Литература	185
Дополнительная литература	185
Глава 7. Влияние тепловых колебаний кристаллической решетки на рассеяние рентгеновских лучей	186
§ 1. Теория колебаний кристаллической решетки по Дебаю и Борну — Карману	186
§ 2. Тепловые колебания кристалла	190
§ 3. Фактор Дебая — Уоллера	194
§ 4. Тепловое диффузное, или бриллюэновское, рассеяние рентгеновских лучей	201
§ 5. Условия Брэгга для бриллюэновского рассеяния	204
§ 6. Рассеяние электронов и нейтронов тепловыми колебаниями решетки	208
Литература	210
Глава 8. Колебания решетки металлов и диэлектриков	211
§ 1. Экспериментальное исследование колебательных спектров	211
§ 2. Результаты экспериментального определения спектров колебаний решетки	214
§ 3. Взаимодействие звуковых и электромагнитных волн в кристаллах	217
§ 4. Решеточная и электронная поляризация	224
§ 5. Природа сегнетоэлектричества	229
Литература	234
Дополнительная литература	235
Глава 9. Энергия решетки ионных кристаллов	236
§ 1. Полная энергия кристалла	236
§ 2. Теория Борна, Ланде и Маделунга	239

§ 3. Электростатическая энергия и задача Маделунга	241
§ 4. Метод Эвальда	246
§ 5. Теория решетки и колебания кристалла	251
§ 6. Квантомеханические расчеты для ионных кристаллов	258
Литература	265
Глава 10. Методы Томаса—Ферми и Вигнера—Зейтца и энергия связи в металлах	266
§ 1. Метод Томаса — Ферми и его применение к теории твердого тела	266
§ 2. Обменная поправка в методе Томаса — Ферми	271
§ 3. Вычисление обменной и корреляционной энергии методом Вигнера — Зейтца	277
§ 4. Метод расчета энергии связи в щелочных металлах по Лёвдину и метод альтернантных молекулярных орбит	282
§ 5. Метод альтернантных молекулярных орбит и антиферромагнетизм	285
Литература	289
Дополнительная литература	290
Глава 11. Кристалл как задача многих тел	292
§ 1. Сравнение одночастичного метода с многочастичным	292
§ 2. Одноэлектронные энергии и электронное возбуждение	295
§ 3. Одноэлектронные энергии в приближении Хартри — Фока	299
§ 4. Потенциал в одноэлектронной задаче Шредингера	302
§ 5. Мультиплетная структура в твердых телах	309
§ 6. Различные формы многоэлектронной теории	315
§ 7. Библиография по многоэлектронной теории	318
Литература	318
Дополнительная литература	319

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. Движение волновых пакетов в периодическом поле	323
Литература	335
2. Волновые функции примесных атомов	336
Литература	355
3. Задача о свободном электроне в магнитном поле в цилиндрических координатах	356
4. Метод Эвальда для кристаллических полей; гранецентрированная кубическая решетка	358
5. Поляризация и притяжение Ван дер Ваальса	368
Литература	404
Дополнительная литература	405
6. Теорема вириала для твердых тел	406
Библиография	408

Дж. Слэтер
ДИЭЛЕКТРИКИ, ПОЛУПРОВОДНИКИ,
МЕТАЛЛЫ

Редактор *В. И. САМСОНОВА*
Художник *М. О. Бишофс*
Художественный редактор *П. Ф. Некундэ*
Технический редактор *М. П. Грибова*

Сдано в производство 7/IV 1969 г.
Подписано к печати 5/XI 1969 г.
Бумага тип. № 3 60×90¹/₁₆ = 20,25 бум. л.
40,5 усл. печ. л. Уч.-изд. л. 47,85,
Изд. № 2/4862. Цена 3 р. 50 к. Зак. 131.

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»
Москва, 1-й Рижский пер., 2.

Ленинградская типография № 2
имени Евгении Соколовой
Главполиграфпрома Комитета по печати
при Совете Министров СССР.
Измайловский проспект, 29.