**Тютерев, Валерий Григорьевич.**

## Спетры колебаний решетки и связанные с ними физические свойства сложных кристаллов : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.10. - Томск, 1999. - 293 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Тютерев, Валерий Григорьевич

1 Введение

2 Колебательные спектры сложных кристаллов с тетраэдрическиой координацией структуры.

2.1 Феноменологические модели решеточной динамики кристаллов.

2.1.1 Общие соотношения.

2.1.2 Модели короткодействующих сил.

2.1.3 Дальнодействующие силы и метод Эвальда.

2.1.4 Модели, учитывающие поляризуемость среды.

2.2 Решеточная динамика соединений А11 В1УС2 и А'В111^1 со структурой халькопирита

2.2.1 Фононные спектры халькопиритов в модели жестких ионов

2.2.2 Учет условий равновесия в динамике решетки тройных соединений.

2.3 Спектры колебаний кристаллов тройных соединений АпВ^пСГ с упорядоченным расположением вакансий.

2.4 Спектр колебаний решетки а — Нд

2.5 Колебания в монослойной сверхрешетке

СаА5)1(АШ)1[001]

2.6 Фононы в короткопериодических сверхрешетках 5г3(те1 и Бг^ез

3 Физические свойства, обусловленные колебаниями решетки в тройных соединениях

3.1 Упругие и термодинамические характеристики.

3.1.1 Внутренние смещения ионов в кристаллах А2£?4С| и А1 В^С^ с решеткой халькопирита в условиях однородной деформации

3.1.2 Расчет сжимаемостей кристаллов со структурой халькопирита в модели Китинга.

3.1.3 Упругие модули кристаллов со структурой халькопирита

3.1.4 Температурная зависимость теплоемкости и дебаевская температура

3.2 Инфракрасная дисперсия света в кристаллах со сложной структурой

3.2.1 Диэлектрическая проницаемость в инфракрасном диапазоне частот

3.2.2 Инфракрасная дисперсия света в кристаллах со структурой халькопирита и анизотропия оптических свойств.

3.3 Расчет многофононного поглощения света в кристаллах тройных полупроводников

3.3.1 Теория многофононного поглощения света в сложных кристаллах

3.3.2 Коэффициент поглощения света в многофононной области для кристаллах со структурой халькопирита.

4 Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах со сложной структурой

4.1 Взаимодействие электронов с длинноволновыми фононами в тройных полупроводниках

4.1.1 Электрический потенциал, создаваемый длинноволновыми фононами

4.1.2 Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах с решеткой халькопирита.

4.2 Анализ температурной зависимости подвижности носителей заряда в полупроводниках

СЛУеАзг с решеткой халькопирита.

4.2.1 Дрейфовая подвижность электронов в СсЮеАвъ

4.2.2 Температурная зависимость дрейфовой подвижности дырок в

СвОёАа

4.3 Междолинное рассеяние электронов на фононах в полупроводниковых кристаллах.

4.3.1 Расчет параметров междолинного рассеяния на фононах в кристаллах АП1ВУ

4.3.2 Псевдопотенциальный расчет междолинных потенциалов рассеяния в монослойной сверхрешетке

А1Аз)! (СаЛйМОМ)

5 Проявления эффектов образования пространственных сверхструктур в колебательных спектрах кристаллов

5.1 Влияние сверхструктур упорядочения кислорода на колебательные спектры высокотемпературных сверхпроводников УВа2Си^От-х

5.1.1 Проблема упорядочения в кислород-дефицитных иттрий-бариевых сверхпроводниках.

5.1.2 Колебательные спектры тетрагональной УВа2Си30& и простой орторомбической УВа2Си30г фаз.

5.1.3 Динамика решетки УВа2Си30т-х в сверхструктурах упорядочения кислорода орто-П и орто-Ш.

5.1.4 Экспериментальные проявления реконструкции фононных спектров в сверхструктурах упорядочения и характеризация структуры

5.2 Нелокальное диэлектрическое экранирование и электрические поля, связанные с оптическими фононами в сверхрешетках.

5.2.1 Нелокальный диэлектрический отклик в фононном диапазоне частот

5.2.2 Элекростатические поля фононов в решеточной динамике

5.2.3 Результаты и обсуждение.

6 Диэлектрическая теория и расчет колебательных спектров в полупроводниковых кристаллах

6.1 Общий квантовомеханический подход к расчету колебательных свойств кристаллов.

6.1.1 Силовые матрицы в адиабатическом приближении.

6.1.2 Метод функционала плотности и теория линейного отклика

6.1.3 Аналитические свойства матрицы поляризуемости.

6.1.4 Динамическая матрица, тензор эффективного заряда и акустическое правило сумм.

6.2 Свойства симметрии диэлектрического отклика в изоляторах.

6.3 Диэлектрическое экранирование в модельной зонной структуре кубического полупроводника

6.4 Расчет колебательных спектров кубических полупроводников в модели неоднородной поляризуемой среды.

6.4.1 Различные пространственные масштабы реакции элекронов на внешнее поле и минимизация функционала электронной плотности

6.4.2 Параметризация функционала кинетической энергии в модели неоднородной поляризуемой среды.

6.4.3 Спектр фононов в модели неоднородной поляризуемой среды.

6.4.4 Реакция системы на однородное внешнее электрическое поле.