

**СОВРЕМЕННЫЕ НАУЧНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ И ВОПРОСЫ
ПРЕПОДАВАНИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ,
ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕД И АСТРОНОМИИ**

**Брест
БрГУ имени А.С. Пушкина
2009**

Учреждение образования
«Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина»

**СОВРЕМЕННЫЕ НАУЧНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ И ВОПРОСЫ
ПРЕПОДАВАНИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ,
ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕД И АСТРОНОМИИ**

Сборник материалов
III республиканской научно-методической конференции
22–23 октября 2009 года

Брест
БрГУ имени А.С. Пушкина
2009

Данному уравнению соответствует дифракция, когда угол между волновым вектором падающей электронной волны де Бройля и волновым вектором отражённой волны равен π . А именно

$$\frac{\pi}{a} - \left(-\frac{\pi}{a}\right) = G. \quad (5)$$

Конечным результатом такой дифракции является образование стоячей волны, групповая скорость которой равна нулю.

Таким образом, запрещённая зона появляется для таких значений энергий электрона, при которых длина волны де Бройля электрона становится соизмеримой с постоянной кристаллической решётки, которая становится в этом случае дифракционной.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блейкмор, Дж. Физика твёрдого тела / Дж. Блейкмор. – М. : Мир, 1988. – 608 с.
2. Белонучкин, В.Е. Курс общей физики. Основы физики / В.Е. Белонучкин, Д.А. Заикин, Ю.М. Ципенюк. – М. : Физматгиз, 2007. – Т. 2. – 608 с.
3. Займан, Дж. Принципы теории твёрдого тела / Дж. Займан. – М. : Мир, 1974. – 472с.
4. Watkins, D. LCAO–MO cluster model for localized states in covalent solids / D. Watkins, R.P. Messmer // Proc. Symposium «Computational methods for large molecules and localized states in solids». Ed. By F. Herman. New York, 1973. – P. 133–146.

УДК 538.245:537.226.1

**А.Ф. РЕВИНСКИЙ¹, И.И. МАКОЕД¹, К.И. ЯНУШКЕВИЧ²,
А.И. ГАЛЯС², О.Ф. ДЕМИДЕНКО², В.Р. СОБОЛЬ³,
Т.В. ДУБИНА³**

¹Брест, БрГУ имени А.С. Пушкина;

²Минск, НПЦ НАН Б по материаловедению;

³Минск, БГАТУ

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РЕШЕТОЧНЫХ КОЛЕБАНИЙ СЕГНЕТОМАГНЕТИКА BiFeO_3

Особенностью сегнетомагнетиков является наличие сосуществования упорядоченных сегнетоэлектрической и ферромагнитной (антиферромаг-

нитной) фаз. Наиболее изученным соединением является феррит висмута. Несмотря на значительное количество известных работ, вопросы о механизме формирования диэлектрического отклика в феррите висмута в диапазоне решеточных резонансов остаются открытыми.

В настоящее время диэлектрический формализм ИК диапазона развит в меньшей мере, чем ультрафиолетового и видимого участков спектра электромагнитных волн. Для последних разработаны методы надежного расчета диэлектрических функций, опирающиеся на результаты теоретического расчета зонной структуры, и получен обширный экспериментальный материал. В связи с этим, актуальным является построение моделей, отражающих процессы, происходящие при взаимодействии электромагнитного излучения с ионным кристаллом в ИК диапазоне. Перспективным для изучения наблюдаемых при этом явлений, представляется метод расчета диэлектрических спектров в модели квазигармонических осцилляторов, максимально учитывающей особенности кристаллического строения изучаемых систем, тип химической связи в решетке, межионные расстояния, массу, валентность и поляризуемость ионов.

Решеточные спектры BiFeO_3 исследованы методами диэлектрической спектроскопии. С использованием программы Reffit [1] выполнено моделирование спектра коэффициента отражения. Параметры осцилляторов в первом приближении рассчитаны на основании простой ионной модели межатомного взаимодействия в сочетании с оптимизацией величин эффективных зарядов ионов и параметров элементарной ячейки. По методу диаграмм Арганда обработаны диэлектрические функции феррита висмута, восстановленные из ИК спектров коэффициента отражения по методу Крамерса-Кронига.

На полученной в инфракрасной области спектральной зависимости коэффициента отражения BiFeO_3 выражены решеточные резонансы, характеризующие колебательные свойства кристаллической решетки. Результаты многочисленных экспериментов подтверждают тот факт, что молекулы сохраняют свою индивидуальность и в твердом состоянии. В частности, об этом свидетельствует наличие в спектрах комбинационного рассеяния и в спектрах ИК-поглощения полос, близких к тем, которые наблюдают в спектрах жидкого или газообразного вещества, состоящего из таких же молекул. Такие моды называют полосами внутренних колебаний, подчеркивая тем самым то, что их происхождение связано с колебательной деформацией молекул. Поскольку в молекулах атомы прочно связаны между собой, то внутренние колебания происходят с высокими частотами. В структуре BiFeO_3 можно выделить FeO_3 комплексы такого типа.

В кристалле, обладающем нецентросимметричной кристаллической решеткой, внутренние колебательные моды проявляются и в инфракрасном

спектре и в спектре комбинационного рассеяния. В случае, когда центр симметрии существует, в каждом из спектров будет присутствовать только половина полос, в соответствии с правилом альтернативного запрета.

В кристаллах со сложной ионной кристаллической решеткой наблюдают также дополнительные моды, частоты которых ниже частот внутренних колебаний. Их можно связать с относительными движениями молекул или групп ионов ячейки. Такие колебания называют внешними. В ионных кристаллах кислородно-октаэдрического типа со структурой перовскита, можно выделить внешние колебания, соотнеся их с движениями октаэдрических комплексов.

Внешние колебания в большей степени отражают симметричные свойства кристалла и исчезают при разрушении кристаллической структуры. При рассмотрении более тонкой структуры спектров, внешние колебания разделяют на трансляционные и вращательные. Под трансляционными осцилляциями понимают колебания атомов и одноатомных ионов или центров масс молекул и многоатомных ионных комплексов. Вращательные осцилляции представляют собой либрации или повороты молекул и многоатомных ионов. Деление внешних колебаний на трансляционные и вращательные, в принципе, довольно условное, так как два данных типа осцилляций, в ряде случаев, обнаруживают сильную взаимосвязь.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kuzmenko, A.B. Kramers-Kronig-constrained variational analysis of optical data / A.B. Kuzmenko // Rev. Sci. Instrum. – 2005. – Vol. 76. – P. 083108– 083112.

УДК 539.12

В.М. РЕДЬКОВ

Минск, Институт физики НАН Беларуси

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ СПИНОРНЫЙ ФОРМАЛИЗМ И ПОЛНОСТЬЮ ПОЛЯРИЗОВАННЫЙ СВЕТ

Исходим из хорошо известных соотношений, определяющих связь между биспинором второго ранга и набором соответствующих тензорных полей (используем обозначения из [1]):

$$U = \Psi \otimes \Psi = \left[-i\Phi + \gamma^b \Phi_b + i\sigma^{ab}\Phi_{ab} + \gamma^5 \bar{\Phi} + i\gamma^b \gamma^5 \bar{\Phi}_b \right] E^{-1}; \quad (1)$$