

никают хаотич. тепловые колебания ионов узлов решётки (см. *Колебания кристаллической решётки*). Рост темп-ры приводит в металлах к росту числа фононов и увеличению сопротивления току, что хорошо наблюдается в чистых металлах в нормальном состоянии. В полупроводниках рост темп-ры также приводит к росту числа носителей заряда. Э.-ф. в. оказывает существен. влияние на явления переноса в этих веществах, а также приводит к междолинным механизмам рассеяния электронов, ослаблению ультразвука, фононному увлечению и др. Кроме того, в кристаллич. решётках имеются отклонения от идеальности (см. *Дефекты в кристаллах*), такие, как дислокации, межузельные атомы той же природы, что и осн. решётка, вакантные узлы, примесные атомы внедрения в междоузлиях и замещение атомов в узлах решётки посторонними атомами.

Квантовомеханич. теория Блоха движения электронов в идеальной замороженной кристаллич. решётке сводит сложную многоэлектронную проблему к задаче о движении отд. электрона под действием строго периодич. потенциала. Волновая ф-ция Блоха, определяющая это движение электрона, представляет собой модулированную с периодом идеальной решётки плоскую волну

$$\psi_{nk}(x) = u_{nk}(x) \exp(-ikx),$$

где n — дискретный номер энергетич. зоны, k — квазиволновой вектор, определённый с точностью до вектора обратной решётки K . Собственные значения энергии $E_n(k)$ также зависят от этих двух квантовых чисел n и k . Если кристалл имеет ограниченные размеры, то векторы k квазидискретные.

Поведение электронов или дырок в кристалле имеет особенно простой вид на краю изотропных зон, когда возможно использование т. н. приближения эфф. массы:

$$E_n(k) \approx E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1)$$

Существенно, что величина $\hbar k$ является не импульсом, а квазимпульсом, и все законы сохранения квазимпульса в процессах столкновения квазичастиц выполняются лишь с точностью до $\hbar K$. Процессы, в к-рых векторы обратной решётки не участвуют, наз. нормальными, а те, в к-рых $\hbar K$ участвуют, — процессами переноса Пайерлса или u -процессами. Эти процессы имеют важное значение для установления термодинамич. равновесия в электрич. поле; в частности, электрон-электронные столкновения определяют электро- и теплопроводность кристаллов (см. *Межэлектронное рассеяние*).

Т. о., в строго периодич. поле кристалла электроны и дырки на краю энергетич. зон ведут себя как свободные заряж. частицы с эфф. массой m . Под действием электрич. поля это привело бы к линейно возрастающей со временем скорости их трансляционного движения и к сколь угодно большому электрич. току. Однако существуют тормозящие силы, действующие на носители тока в кристалле и ограничивающие их скорости. Причиной торможения являются процессы рассеяния электронов на всех отклонениях от идеальности кристаллич. решётки, так что протекание тока в кристалле сопровождается сопротивлением.

Особого рассмотрения требует явление *сверхпроводимости*, при к-ром наблюдается устойчивое к нарушениям решётки квантовое макроскопич. движение электронов. В нормальном, т. е. несверхпроводящем, состоянии вещества протекание электрич. тока всегда сопровождается сопротивлением, к-рое существенно зависит от темп-ры. Одной из причин такой зависимости является увеличение амплитуды тепловых колебаний ионов с ростом темп-ры T и усилением столкновений электронов с ними.

Колебания кристаллической решётки. Методы описания колебаний кристаллич. решётки вследствие тепловых движений ионов, находящихся в её узлах, основаны на разложении в ряд Тейлора потенц. энергии решётки $U(\dots R_{nj} \dots)$ по степеням малых смещений u_{nj} ионов из их положения равновесия $R_{nj} = R_{nj}^0 + u_{nj}$; здесь $n = n_1 a + n_2 b + n_3 c$ — вектор, определяющий положение элементарной ячейки кристал-

ла. Предполагается, что таких ячеек в кристалле N и в каждой ячейке имеется ν ионов, положение к-рых в данной ячейке определяется векторами j . Векторы a, b, c определяют постоянные решётки по трём направлениям.

Разложение величины U по степеням смещений u_{nj} содержит гармонические, т. е. квадратичные, а также ангармонические — кубические и более высокие формы по этим векторам с соответствующими коэф. упругости. Простейшее приближение является квадратичным (см. *Динамика кристаллической решётки*). Оно диагонализуется в нормальных координатах, что приводит к определению 3ν ветвей частот $\omega_\alpha(k)$ и ортов, определяющих направления нормальных колебаний системы. Т. к. каждая величина k принимает N дискретных значений, то в гармонич. приближении имеем дело с $3\nu N$ независимыми гармонич. осцилляторами, описываемыми в данном приближении колебания кристаллич. решётки. Энергия независимых осцилляторов имеет вид

$$H = U_0 + \sum_{\alpha k} \hbar \omega_\alpha(k) (a_{\alpha k}^+ a_{\alpha k} + 1/2), \quad (2)$$

где α нумерует 3ν ветвей спектра колебаний решётки, $\hbar \omega_\alpha(k)$ — квант энергии колебаний кристаллич. решётки — фонон. Каждый фонон обладает квазимпульсом $\hbar k$ и энергией $\hbar \omega_\alpha(k)$. Набор собств. частот колебаний решётки определяется только упругими свойствами решётки и массами атомных ядер.

Из 3ν ветвей колебаний имеются 3 акустические, при к-рых смещения ионов элементарной ячейки происходят в фазе и элементарная ячейка смещается как единое целое. Эти колебания сопровождаются локальными сжатиями и разрежениями. При $k=0$ частоты этих колебаний равны нулю. Если атомы элементарной ячейки смещаются в противофазе, то они оставляют центр масс ячейки в покое, но вызывают смещение центров тяжести зарядов и сопровождаются появлением дипольного электрич. момента. Эти колебания оказываются оптически активными и наз. оптическими колебаниями. Соответствующие кванты наз. оптич. фононами: число их видов равно $3(\nu-1)$, причём при $k=0$ энергии этих фононов не равны нулю.

Т. о., в гармонич. приближении колеблющийся кристаллич. решётка заменяется набором независимых фононов, свободно перемещающихся в кристалле. Энергия, переносимая фононами, перемещается с групповой скоростью фононов, и в этом приближении для потока тепла нет сопротивления.

В этом приближении нет также и теплового расширения кристалла, т. к. ср. смещение ионов равно нулю. Это хорошо видно, если учесть, что смещение ионов u_{nj} после разложения по плоским волнам оказывается линейной формой от безразмерных координат q_k или от импульсов p_k фононов:

$$q_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_k + a_{-k}^+), \quad p_k = \frac{i}{\sqrt{2}}(a_k^+ - a_{-k}). \quad (3)$$

В континуальном пределе это разложение для смещения $u(x)$ имеет вид

$$u(x) = \sum_{\mu} \sum_q \sqrt{\frac{\hbar}{2U\rho_{\mu}(q)}} e_{\mu}(q) (a_{\mu q} + a_{-\mu q}^+) e^{-iqx}. \quad (4)$$

где $e_{\mu}(q)$ — единичный вектор направления поляризации фонона, ρ — плотность вещества. Очевидно, что в гармонич. приближении ср. значение квантовых амплитуд рождения и уничтожения фононов a_q^+, a_q [и, следовательно, самого смещения $u(x)$] равно нулю. Благодаря ангармонич. слагаемым в разложении энергии решётки U , к-рые становятся весьма существенными при увеличении темп-ры, возникают процессы столкновения фононов с фононами, в к-рых участвуют три, четыре или большее число фононов. В результате этих процессов возникает теплосопротивление; кроме того, благодаря ангармонизмам средние значения смещений ионов оказываются отличными от нуля, и это обуславливает тепловое расширение кристалла.