

### § 3. Приближение малых колебаний

В рамках адиабатического приближения уравнение (2.5а) описывает поведение электронов в любой атомной системе — твердом теле, жидкости, газе, отдельной молекуле и т. д. Специализируя его для идеального кристалла, надо считать, что атомные ядра расположены в узлах кристаллической решетки. Очевидно, соответствующие значения  $R$  должны отвечать минимуму потенциальной энергии ядер (2.7): в противном случае решетка была бы неустойчива. Само выражение (2.7), фигурирующее в уравнении (2.5б), естественно разложить в ряд по малым отклонениям от положений равновесия. Это *приближение малых колебаний* оправдано, пока амплитуда колебаний мала по сравнению с постоянной решетки, т. е. пока температура кристалла не слишком близка к точке плавления. Пользуясь таким приближением, мы приходим к постановке задачи о малых колебаниях, принятой в гл. XII.

Согласно (2.7) потенциальная энергия системы ядер зависит от состояния электронов. Следовательно, то же относится и к положениям равновесия, и к частотам нормальных колебаний: последние, как мы знаем, определяются вторыми производными от функции  $V(R)$  (2.7), взятыми в точке ее минимума. Таким образом, разным состояниям системы электронов соответствуют, вообще говоря, различные фоновые спектры. Это обстоятельство не играло существенной роли в теории подвижности, ибо, как мы видели в § XIV.4, изменение энергии электрона при поглощении или испускании одного акустического фона сравнительно невелико. Однако при захвате электрона примесным центром или иным структурным дефектом решетки положение может измениться. Как мы увидим в § 9, это обстоятельство существенно для правильной оценки вероятности захвата.

До сих пор мы говорили о тяжелых частицах как об атомных ядрах. Однако весьма часто роль тяжелых частиц могут играть и атомные остовы, содержащие электроны внутренних оболочек. Действительно, энергия связи внутренних электронов с ядром обычно столь велика, что состояния их лишь очень мало меняются как при образовании кристалла, так и при различных электронных процессах в нем \*). Далее, внутренние электроны в среднем располагаются гораздо ближе к ядру, нежели валентные. Большей степени локализации отвечает и большая кинетическая энергия: валентные электроны движутся в среднем заметно медленнее внутренних. Это позволяет вновь применить адиабатическое приближение, рассматривая на сей раз внутренние электроны как «быструю подсистему», а валентные — как «медленную»; такой подход оправдан, коль

\*) Исключение могут составить лишь атомы самых легких элементов.

скоро энергии ионизации первых гораздо больше, нежели вторых. Таким образом, оказывается возможным рассматривать систему валентных электронов, движущихся в поле атомных ядер и среднем поле внутренних электронов. Иначе говоря, индекс  $i$  в уравнении (2.5а) нумерует теперь только валентные электроны, а величина  $U_2$  есть потенциальная энергия электрона в поле атомного остова. Это приближение можно назвать валентным. Им обычно пользуются при изучении большинства полупроводников. Пример, когда валентное приближение может оказаться недостаточным, представляют вещества, содержащие ионы или атомы переходных или редкоземельных элементов: электроны незаполненных внутренних оболочек также надо рассматривать явно.

Подчеркнем, наконец, что разделение всех электронов на «входящие в атомные остовы» и «рассматриваемые явно» не носит абсолютного характера, а зависит от изучаемого явления. Если энергия какого-либо внешнего воздействия сравнима с энергией ионизации внутренних оболочек, то соответствующие электроны надо рассматривать явно. Так, например, обстоит дело в случае поглощения рентгеновских лучей кристаллами или при прохождении быстрых атомных частиц через вещество.

#### § 4. Роль колебаний решетки. Полярон

Обратимся ко второму из вопросов, поставленных в § 1, — о роли неизбежной неидеальности решетки, связанной с ее колебаниями. В сущности, ответ на этот вопрос содержится уже в принятой в гл. XIV постановке задачи о рассеянии носителей заряда: в задаче об энергетическом спектре электронов неидеальностью решетки можно пренебречь, если она достаточно мало влияет на полную энергию электрона. Соответствующий количественный критерий не отличается от условий применимости кинетического уравнения (XIV. 2.22а, б).

Как показывают оценки, во всех исследованных до сих пор материалах взаимодействие носителей заряда с акустическими колебаниями оказывается слабым в указанном смысле. То же относится и к взаимодействию с оптическими колебаниями в неполярных кристаллах и в полупроводниках типа  $A^{III}B^V$ . Положение, однако, радикально меняется при переходе к ионным кристаллам — щелочно-галогидным и др. Взаимодействие электронов и дырок с продольными оптическими колебаниями в этих веществах оказывается столь сильным, что знак в неравенстве (XIV. 2.22а) может измениться на обратный.

Причину этого легко понять. В ионных кристаллах продольные оптические колебания решетки связаны с изменениями дипольных моментов элементарных ячеек. При этом меняется и вектор инер-