в пространстве волновых векторов была точкой зеркальной симметрии. Тогда зону Бриллюэна называют *основной*. Вектор $\boldsymbol{K}$ (56.15) при любых целых числах n_1, n_2, n_3 принято называть *вектором обратной решетки*.

ЗАДАЧА

Почему формула (56.14) не переходит в формулу (56.5) при $M = m$?

§ 57. Фононы и квазичастицы

1. Внутреннее движение покоящегося тела может быть описано указанием движения каждой индивидуальной частицы, из которых состоит тело. Такой способ может быть назван *индивидуальным* описанием движения. Но возможен и *коллективный* способ, когда движение тела в целом рассматривается как результат наложения движений, в каждом из которых участвуют все частицы тела. Второй способ может обладать преимуществом в тех случаях, когда частицы тела взаимодействуют друг с другом. Тогда разложение полного движения тела на составляющие коллективные движения может быть произведено так, чтобы каждое составляющее коллективное движение могло быть возбуждено в отдельности. Если возбужденное движение тела не очень интенсивно, то оно всегда может быть разложено на плоские монохроматические волны различных частот, распространяющиеся в теле в различных направлениях практически независимо друг от друга. При увеличении интенсивности возбуждения наступают *нелинейные* явления. Однако если отступления от линейности не очень значительны, то по-прежнему можно пользоваться разложением на плоские монохроматические волны, но между отдельными волнами возникает взаимодействие.

Оба способа описания движения в классической физике принципиально равноправны. Но в квантовой физике преимущество отдается второму способу. Причина этого заключается в квантовании. Уже Дебай в теории теплоемкости твердого тела (см. § 54) с успехом подверг квантованию энергию стоячих монохроматических волн, на которые может быть разложено движение тела. В вопросе о теплоемкости проводить дальнейшее разложение стоячих волн на бегущие не обязательно, поскольку в этом случае интерес представляет энергия тела в состоянии статистического равновесия, а, например, не его импульс, который для покоящегося тела равен нулю в любой момент времени. Но при рассмотрении различных процессов в телах, даже при наличии локального статистического равновесия, надо перейти к разложению движения на бегущие волны и к их квантованию.

В соответствии с гипотезой де Бройля, подтвержденной опытными фактами, с каждой бегущей монохроматической волной

связаны энергия и импульс, определяемые соотношениями

$$\mathscr{E} = \hbar\omega, \quad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}, \tag{57.1}$$

введенными по аналогии с теорией фотонов. Волна, несущая энергию и импульс, определяемые формулами (57.1), в каком-то отношении ведет себя как частица. Частица, уподобляемая звуковой волне в вышеуказанном смысле, называется *фононом*. Не надо вкладывать в представление о фононе нечто большее, чем то, что содержится в этом определении. Фонон несет энергию и импульс, связанные с частотой волны ω и волновым вектором $\boldsymbol{k}$ посредством постоянной Планка $\hbar$. Но бессмысленно, например, говорить о форме и размерах фонона, представляя его каким-то маленьким шариком. Поэтому фонон называют не «частицей», а «квазичастицей», а его импульс — «квазиимпульсом». В пунктах 3 и 4 будут приведены дальнейшие соображения, оправдывающие эту терминологию.

Строго определенные значения величины ω и $\boldsymbol{k}$ имеют только в случае неограниченных плоских волн. Реальное же существование имеют только *пространственно ограниченные* волны. Реальным образом фонона является не бесконечная, а ограниченная волна, например волновой пакет.

2. Гипотеза фононов согласуется, например, с существованием *звукового давления*. Рассмотрим ради простоты изотропную сплошную среду (изотропное твердое тело, жидкость, газ), в которой распространяется монохроматическая плоская продольная звуковая волна, нормально падающая на плоскую границу твердого тела и поглощаемая им. Такая волна ежесекундно передает единице поверхности твердого тела импульс $cN\hbar k$, где c — скорость звука, а N — число фононов в единице объема среды. Этот импульс и есть давление $\mathscr{P}$, оказываемое звуком на тело. Поскольку сплошная среда недиспергирующая, скорость звука в ней c совпадает с фазовой скоростью $c_{\text{фаз}} = \omega/k$. Поэтому

$$\mathscr{P} = \varepsilon, \tag{57.2}$$

где $\varepsilon = N\hbar\omega$ — объемная плотность звуковой энергии, падающей на тело. Формула (57.2) справедлива и в общем случае нормального падения волны при наличии отражения и прохождения. Только в этом случае плотность энергии дается выражением $\varepsilon = (1 + r)N\hbar\omega$, где r — *коэффициент отражения*. Полученные результаты согласуются с опытом и с тем, что дает классическая гидродинамика.

3. В изотропных твердых сплошных телах могут возбуждаться фононы двух типов — *продольные* и *поперечные*. В случае изотропных сред частоты поперечных фононов определяются только длиной волны и не зависят от их поляризации. В кристаллах, помимо продольных и поперечных, могут возбуждаться

и другие фононы, соответствующие различным частотам и типам поляризации колебаний. (Как правило, в кристаллах «продольные» и «поперечные» волны не являются строго продольными и строго поперечными.) Для всех таких фононов справедливы соотношения (57.1). Только в этих случаях частота колебаний ω связана с волновым вектором $\boldsymbol{k}$ не обязательно линейной однородной зависимостью, как было при отсутствии дисперсии, а зависимостью более сложного вида $\omega = \omega(\boldsymbol{k})$. Такого рода зависимости называются *дисперсионными соотношениями*. Они различны для различных фононов. Примерами дисперсионных соотношений могут служить формулы (56.5) или (56.14), выведенные для одномерных цепочек атомов.

Волновой вектор $\boldsymbol{k}$ волны в кристаллической решетке определен *не однозначно*, а с точностью до слагаемого, равного вектору обратной решетки (см. § 56, пункт 6). В соответствии с этим и вектор $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ определен также *неоднозначно*. Но можно устранить эту неоднозначность, если ограничить область изменения $\boldsymbol{k}$ основной зоной Бриллюэна, что мы и будем делать. Так однозначно определенный вектор $\boldsymbol{p}$ называется *квазиимпульсом* фонона. Самый фонон, поскольку ему свойственны признаки частицы, называется *квазичастицей*, о чем уже было сказано раньше. Такой термин вводится, чтобы подчеркнуть, что квазичастица не является «настоящей» частицей.

Квазичастицы вводятся и в других разделах физики. Так, квазичастицами являются фотоны в вакууме и в особенности в среде. Представление о них согласуется с такими явлениями, как интерференция, эффект Допплера, эффект Вавилова — Черенкова, изменение частоты света при распространении в гравитационном поле. Мы уже рассматривали эти явления с точки зрения существования квазичастиц света, хотя и не пользовались самим термином «квазичастица».

4. В идеальной кристаллической решетке, свободной от посторонних примесей и лишенной различных дефектов (примесные атомы, атомы в междоузлиях, незаполненные узлы), плоская звуковая волна в линейном приближении должна распространяться *без затухания* и *рассеяния в стороны*. Линейное приближение означает, что разложение потенциальной энергии кристалла по степеням смещений атомов из положений равновесия обрывается на членах *второй* степени. Тогда возникают волны с гармоническими колебаниями атомов, или фононы, *не взаимодействующие друг с другом*. При наличии членов высших степеней, если они достаточно малы (а это, как правило, имеет место всегда, пока решетка не разрушена, т. е. вплоть до температуры плавления), также можно говорить о распространении плоских волн, или фононов, в кристалле. Однако в этом случае наступает *взаимодействие различных волн* (*фононов*). Поскольку энергия и импульс фононов квантуются, такое

взаимодействие носит характер *столкновений*, в которых происходит уничтожение старых и рождение новых фононов. Наличие в потенциальной энергии членов третьей степени приводит к столкновениям, в которых одновременно участвуют три фонона. При наличии членов четвертой степени появляются столкновения четырех фононов и т. д.

Фононы и вообще квазичастицы хорошо приспособлены для описания *слабых* коллективных возбуждений в телах. Между последовательными столкновениями фонон движется свободно, и если «длина свободного пробега» его достаточно велика по сравнению с постоянной кристаллической решетки, то возбужденное состояние кристалла можно в известном отношении рассматривать как *фононный газ*. При этом число фононов не сохраняется, что дает основание рассматривать их как *бозе-частицы* (*бозоны*).

На рис. 101 графически изображены примеры возможных взаимодействий фононов. Фононы изображены стрелками, а

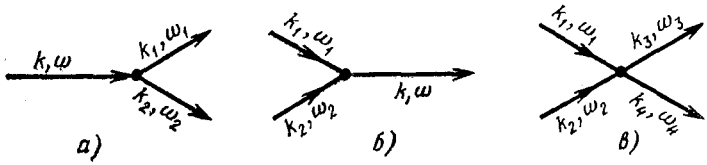

Рис. 101

факты их взаимодействия — кружками. Рис. 101, *а* соответствует распаду фонона $\boldsymbol{k}$, ω на два фонона $\boldsymbol{k}_1$, ω_1 и $\boldsymbol{k}_2$, ω_2. Рис. 101, *б* изображает столкновение фононов $\boldsymbol{k}_1$, ω_1 и $\boldsymbol{k}_2$, ω_2, в результате которого возникает один фонон $\boldsymbol{k}$, ω. На рис. 101, *в* изображено столкновение двух фононов $\boldsymbol{k}_1$, ω_1 и $\boldsymbol{k}_2$, ω_2, завершающееся возникновением двух новых фононов $\boldsymbol{k}_3$, ω_3 и $\boldsymbol{k}_4$, ω_4.

При взаимодействии фононов соблюдается *закон сохранения энергии*. В случае процесса, изображенного на рис. 101, *а*, он записывается в виде

$$\hbar\omega = \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 \tag{57.3}$$

и аналогично в других случаях. Однако закон сохранения квазиимпульса *может и не соблюдаться*. Причиной этого является неоднозначность волнового вектора $\boldsymbol{k}$, отмеченная выше. Действительно, разложим, например, вектор $\boldsymbol{k}$ на два вектора: $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_1' + \boldsymbol{k}_2'$ (рис. 102). Вектор $\boldsymbol{k}$ предполагается лежащим в основной зоне Бриллюэна, так что при нашем ограничении $\hbar\boldsymbol{k}$ является квазиимпульсом. Но предположим, что составляющие векторы $\boldsymbol{k}_1'$ и $\boldsymbol{k}_2'$ (или по крайней мере один из них) настолько

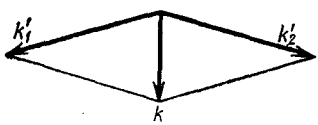

Рис. 102

длинны, что они не умещаются в основной зоне Бриллюэна. Тогда, при нашем ограничении, векторы $\hbar \boldsymbol{k}_1'$ и $\hbar \boldsymbol{k}_2'$ не будут квазиимпульсами. Квазиимпульсы $\hbar \boldsymbol{k}_1$ и $\hbar \boldsymbol{k}_2$ получаются из них путем прибавления векторов вида $2\pi n \boldsymbol{K}$, где $\boldsymbol{K}$ — вектор обратной решетки (56.15), а $n = 0, \pm 1, \ldots$. Например, для процесса, соответствующего рис. 101, *а*, следует писать

$$\hbar \boldsymbol{k}_1 + \hbar \boldsymbol{k}_2 = \hbar \boldsymbol{k} + 2\pi \boldsymbol{K}. \tag{57.4}$$

Если $n=0$, то в процессе взаимодействия фононов квазиимпульс сохраняется. Такие процессы называются *нормальными*. Если же $n \neq 0$, то соответствующие процессы называются *процессами переброса*. Существование процессов переброса лишний раз оправдывает введение терминов «квазичастица» и «квазиимпульс» вместо простых терминов «частица» и «импульс».

Конечно, соотношения вида (57.3) и (57.4) справедливы не только при взаимодействии фононов между собой, но и при взаимодействии их с другими частицами и квазичастицами, например с фотонами. При переводе на классический язык эти соотношения выражают *законы интерференции волн*, *принцип Допплера* и вообще *законы изменения частоты волн при различных процессах*. Вот почему комбинационное рассеяние света, рассеяние Мандельштама — Бриллюэна, эффект Вавилова — Черенкова, изменение частоты света при распространении в гравитационном поле и другие явления могут быть истолкованы как с волновой точки зрения, так и с помощью представления о квазичастицах.

5. Воспользуемся теперь представлением о фононах для рассмотрения *теплопроводности твердых тел*. Мы имеем в виду диэлектрики, а не металлы. В диэлектриках перенос тепла осуществляется *фононами*, тогда как в металлах основную роль в этом процессе играют *электроны*. Само понятие теплопроводности относится к *локально равновесному* состоянию неподвижного тела, каждой точке которого можно приписать определенную температуру. Чтобы получить полностью равновесное состояние тела, можно, например, заключить его в жесткую оболочку, поддерживаемую при постоянной температуре. Тогда в результате теплового возбуждения фононов, их поглощения и рассеяния на других фононах, на примесях и дефектах решетки, на границах тела и окружающей оболочки, в конце концов установится *полностью термодинамически равновесное* состояние тела, однозначно определяемое только температурой оболочки. Оно характеризуется вполне определенным значением плотности энергии фононов в пространстве, вполне определенным распределением ее по спектру частот, хаотическим (в частности, изотропным) распределением направлений распространения фононов. В этом отношении равновесное состояние фононов в полости напоминает аналогичное состояние фотонов — черное

излучение. Локально равновесное состояние тела отличается от полностью равновесного тем, что температура тела меняется от точки к точке, а все прочие параметры, характеризующие состояние тела с фононами, успевают принять практически равновесные значения, соответствующие этой температуре. Локально равновесное состояние и имеется в виду при рассмотрении теплопроводности.

6. Будем сначала предполагать, что кристалл идеальный, т. е. не содержит примесей, а кристаллическая решетка лишена всех дефектов. Совокупность фононов в теле будем рассматривать как *фононный газ* и воспользуемся для его теплопроводности формулой

$$\varkappa = {}^1/_3 \bar{v} C \lambda, \tag{57.5}$$

которую дает элементарная теория газов (см. т. II, § 89). Здесь C — теплоемкость единицы объема тела (в прежних обозначениях $C = nmc_v$), $\bar{v}$ — средняя скорость фонона в теле, λ — средняя длина свободного пробега фонона. Величина $\bar{v}$ имеет смысл средней скорости звука в теле, C определяется в квантовой теории теплоемкости твердого тела. Обе эти величины могут быть измерены экспериментально. Наибольшие трудности встречает определение величины λ. В гармоническом (линейном) приближении звуковые волны (фононы) распространяются в идеальном кристалле, не встречая никаких препятствий. В этом приближении нет столкновений между фононами. Если бы кристалл был безграничным, то λ, а с ней и теплопроводность $\varkappa$ были бы бесконечно большими. В следующих приближениях, когда в потенциальной энергии решетки учитываются члены третьей и высших степеней относительно смещений атомов из положений равновесия, появляются столкновения между фононами, ограничивающие их длины свободного пробега. Основное значение имеют члены третьей степени, приводящие к тройным столкновениям (см. рис. 101, *а* и 101, *б*).

7. Однако *нормальные столкновения между фононами не влияют на теплопроводность кристалла.* Причина этого та же, что и в аналогичном случае прохождения электрического тока через металл: электрическая проводимость металлов связана с длиной свободного пробега электронов и дырок, но столкновения между самими электронами и самими дырками на нее не оказывают никакого влияния (т. III, § 42, п. 2). Действительно, при нормальных столкновениях квазиимпульс фонона совпадает с истинным импульсом, а последний при столкновениях сохраняется. Энергия при столкновениях также сохраняется. При распаде фонона прежний фонон исчезает, а вместо него появляются два новых фонона, которые и переносят через кристалл те же энергию и импульс. При столкновении двух фононов они исчезают, передавая импульс и энергию образовавшимся двум новым фо-

нонам, которые также продолжают нести их через кристалл. Так происходит при трехфононных процессах. Аналогичное имеет место в столкновениях с одновременным участием четырех, пяти и более фононов. Таким образом, нормальные столкновения между фононами не могут замедлить передачу энергии или импульса через кристалл. Если бы все столкновения между фононами были нормальными, то теплопроводность бесконечной идеальной решетки была бы также бесконечной.

Возникает вопрос, почему приведенные рассуждения неприменимы к теплопроводности газа, состоящего из обычных частиц (атомов и молекул), хотя в этом случае при столкновениях также соблюдаются законы сохранения энергии и импульса? Дело в том, что при столкновениях частиц обычного газа они не уничтожаются и не рождаются. Налетающая частица, сама не уничтожаясь, при столкновении передает импульс и энергию уже существующим, а не рождающимся вновь частицам. При этом в газе нет переноса вещества, а передача энергии не полная. Энергия ударяющей частицы в результате столкновения может и уменьшаться, и увеличиваться Но если в газе есть градиент температуры, то энергия «горячих» частиц преимущественно уменьшается, а «холодных» увеличивается. Благодаря этому в газе и возникает поток тепла, направленный в сторону более низкой температуры.

Из приведенных рассуждений следует, что *теплопроводность идеального кристалла может быть связана только с такими столкновениями фотонов, которые сопровождаются процессами переброса*, так как при этих столкновениях не соблюдается закон сохранения квазиимпульса. Значит, только эти столкновения и должны быть приняты во внимание при вычислении средней длины свободного пробега фонона, входящей в формулу (57.5).

8. Впрочем, сами вычисления очень громоздки и не могут быть выполнены без подробных сведений о межатомных силах взаимодействия в кристалле, которыми для большинства кристаллов мы не располагаем. С этим связано неудовлетворительное состояние теории: есть четкие физические представления и методы расчета, которыми, однако, нельзя воспользоваться для получения окончательных количественных результатов. Мы ограничимся только краткими качественными соображениями.

Вблизи абсолютного нуля температур, когда тепловых фононов практически нет, средняя длина свободного пробега фонона ограничивается размерами кристалла. Здесь дело обстоит аналогично тому, что имеет место в случае ультраразреженных газов, когда длина свободного пробега молекулы велика по сравнению с размерами сосуда, в котором заключен газ (см. т. II, § 95). Полагая в формуле (57.5) $\lambda = l$, где l — размеры кристалла, мы получим величину $\varkappa$, которая будет характеризовать

не только внутренние свойства кристалла, но будет зависеть и от его размеров. При низких температурах скорость $\bar{v}$ практически постоянна, а теплоемкость по теории Дебая пропорциональна T^3, поэтому и теплопроводность кристалла будет также пропорциональна T^3.

При повышении температуры влияние размеров кристалла отойдет на второй план. Определяющими будут *столкновения между фононами*, сопровождающиеся процессами переброса. За счет этого, а также за счет увеличения теплоемкости произойдет и быстрое увеличение теплопроводности. В этой области температур величина λ, а с ней и теплопроводность $\varkappa$ кристалла уже перестают зависеть от размеров кристалла, а становятся только его внутренними свойствами. В области высоких температур можно ожидать зависимости $\varkappa \sim 1/T$. Действительно, в этой области справедлив классический закон равномерного распределения кинетической энергии по степеням свободы, в силу которого энергии всех фононов становятся одинаковыми (не зависящими от частоты ω). Поэтому плотность фононов N пропорциональна плотности энергии, т. е. T, а теплоемкость C достигает классического предела, который не зависит от T. Поэтому средняя длина свободного пробега фонона $\lambda \sim 1/N$, а с ней и теплопроводность $\varkappa$ становятся пропорциональными $1/T$.

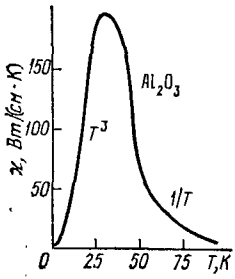

Рис. 103

Из изложенного ясно, что при повышении температуры теплопроводность диэлектрического кристалла должна проходить через максимум. Это отчетливо проявляется на рис. 103, где приведена экспериментальная кривая теплопроводности, полученная для искусственного сапфира (Al_2O_3). Максимум на кривых для различных веществ проявляется не всегда так резко. Причиной этого являются примеси и дефекты кристаллической решетки, вносящие дополнительное теплосопротивление и уменьшающие ее теплопроводность.

ЗАДАЧИ

1. *Определить давление, оказываемое звуковой волной на границу раздела двух изотропных непоглощающих сплошных сред* (рис. 104).

Решение. Так как нормальные слагающие потока энергии по обе стороны границы раздела сред одинаковы, то

$$N_1 \varepsilon c_1 \cos\varphi - N_1' \varepsilon c_1 \cos\varphi = N_2 \varepsilon c_2 \cos\psi,$$

где N_1, N_1' и N_2 — числа падающих, отраженных и прошедших фононов в единице объема, c_1 и c_2 — скорости звука в средах *1* и *2*, $\varepsilon = \hbar\omega$ — энергия фонона (одинаковая в обеих средах). Введя коэффициент отражения

$r = N_1'/N_1$, отсюда получим

$$N_2 = \frac{c_1 \cos\varphi}{c_2 \cos\psi}(1 - r) N_1.$$

Искомое давление $\mathscr{P}$ равно нормальной составляющей импульса, которую передает звук единице границы раздела сред:

$$\mathscr{P} = N_1 p_1 c_1 \cos^2\varphi - \left(N_2 p_2 c_2 \cos^2\psi - N_1' p_1 c_1 \cos^2\varphi\right).$$

Так как сплошная среда не обладает дисперсией, то $pc = \varepsilon$. Поэтому, используя значения N_1' и N_2, приведенные выше, и вводя плотность энергии падающей звуковой волны $\mathscr{E} = N_1\varepsilon$, получим

$$\mathscr{P} = \mathscr{E} \cos\varphi \operatorname{ctg}\psi \{(1 + r)\cos\varphi \operatorname{tg}\psi - (1 - r)\sin\varphi\}. \quad (57.6)$$

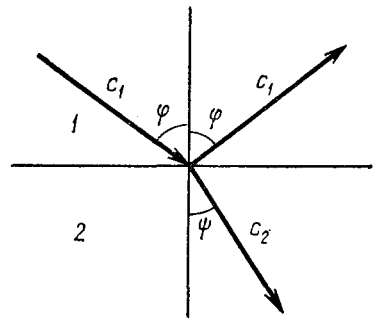

Рис. 104

2. Используя представление о фононах, получить формулу для тонкой структуры Мандельштама — Бриллюэна (см. т. IV, § 99).

Решение. Связь между энергией и импульсом для света в среде (фотона) и звука (фонона) имеет вид

$$p_{\text{фот}} = \frac{n\mathscr{E}_{\text{фот}}}{c}, \quad p_{\text{зв}} = \frac{\mathscr{E}_{\text{зв}}}{v_{\text{зв}}}, \quad (57.7)$$

где c — скорость света в вакууме, а $v_{\text{зв}}$ — скорость звука (фонона) в среде. К таким же соотношениям приводит и классическая теория. Уравнения сохранения энергии и импульса при излучении и поглощении фонона:

$$\mathscr{E}_{\text{зв}} = \pm\left(\mathscr{E}_{\text{фот}} - \mathscr{E}'_{\text{фот}}\right), \quad \boldsymbol{p}_{\text{зв}} = \pm\left(\boldsymbol{p}_{\text{фот}} - \boldsymbol{p}'_{\text{фот}}\right),$$

где плюс перед скобками относится к излучению, а минус — к поглощению фонона. Нештрихованными величинами обозначены энергия и импульс фотона до, а штрихованными — после излучения или поглощения фонона. Второе уравнение умножим на c/n, возведем оба уравнения в квадрат, а затем почленно вычтем. Тогда, используя связь между энергией и импульсом, получим

$$\left(\frac{c^2}{n^2 v_{\text{зв}}^2} - 1\right)\mathscr{E}_{\text{зв}}^2 = 4\mathscr{E}_{\text{фот}}\mathscr{E}'_{\text{фот}} \sin^2\frac{\vartheta}{2},$$

где ϑ — угол между направлениями падающего и рассеянного фотонов. В последнем уравнении слева единицей в скобках можно пренебречь, а справа $\mathscr{E}'_{\text{фот}}$ заменить на $\mathscr{E}_{\text{фот}}$, так как энергия фонона пренебрежимо мала. Сделав это и извлекая квадратный корень, получим

$$\mathscr{E}_{\text{зв}} = \pm 2n\frac{v_{\text{зв}}}{c}\mathscr{E}_{\text{фот}} \sin\frac{\vartheta}{2},$$

или

$$\mathscr{E}_{\text{фот}} - \mathscr{E}'_{\text{фот}} = \pm 2n\frac{v_{\text{зв}}}{c}\mathscr{E}_{\text{фот}} \sin\frac{\vartheta}{2}. \quad (57.8)$$

Это соотношение — чисто классическое. При его выводе были использованы только законы сохранения энергии и импульса, а также связь между энергией и импульсом для света и звука, которая также является классиче-

ской. Переход от энергии к частоте производится уже с помощью квантовых соотношений $\mathscr{E}_{\text{фот}} = \hbar\omega$ и $\mathscr{E}_{\text{зв}} = \hbar\omega_{\text{фон}}$, причем существенно, что в обоих соотношениях постоянная $\hbar$ — одна и та же. В результате при квантовой интерпретации получается такая же формула

$$\omega - \omega' = \pm 2n \frac{v_{\text{зв}}}{c} \omega \sin \frac{\vartheta}{2}, \tag{57.9}$$

как и в классической теории. Однако окончательный результат совершенно не зависит от численного значения постоянной Планка.

§ 58. Энергетические зоны в твердых телах

1. В § 100 т. III было введено понятие об энергетических зонах в кристаллах. Это понятие существенно опирается на квантовые представления, о которых в т. III могли быть сообщены лишь предварительные сведения. Поэтому здесь мы опять вернемся к вопросу об энергетических зонах. Нас будет интересовать только принципиальная качественная сторона вопроса, а не точные количественные результаты, требующие сложных и громоздких вычислений. К тому же для реальных кристаллов при настоящем состоянии теории провести точные вычисления невозможно. Мы вынуждены довольствоваться простейшими моделями и наглядными соображениями. Содержание этого параграфа полезно сопоставить с содержанием § 100 т. III.

Принципиально можно было бы поступить так, как это уже было намечено в т. III, § 100. Возьмем очень большое число тождественных атомов, удаленных друг от друга настолько далеко, что взаимодействие между ними очень мало и практически ни в чем не проявляется. В таком случае каждый из атомов ведет себя как изолированный. Ему свойственны определенные энергетические уровни. Система из N удаленных атомов будет иметь те же уровни энергии, но каждый уровень повторится N раз. Начнем теперь непрерывно сближать атомы. Появится взаимодействие между ними, в результате чего каждый первоначальный энергетический уровень станет как-то непрерывно смещаться. В конце концов из большого числа N атомов образуется кристалл. Проследив за эволюцией отдельных энергетических уровней, можно определить и энергетические уровни образовавшегося кристалла.

Конечно, при большом числе N атомов провести эту программу практически невозможно. Но это можно сделать для случая двух атомов. Полученные результаты можно будет использовать для выяснения вопроса, как качественно будет вести себя и система из большого числа атомов. Более того, для дальнейшего упрощения можно заменить реальный атом мысленным «одномерным атомом», проще всего — гармоническим осциллятором. Это фактически уже было сделано в § 52 при выяснении природы молекулярных сил (см. также т. III, § 137). Повторим