

волны расположено много атомов, колеблющихся почти синхронно, и их взаимное расположение не слишком существенно. Макс. частоты колебаний в аморфных телах мало отличаются от макс. частот в кристаллах, т. к. определяются силами взаимодействия между ближайшими атомами. В результате этого, а также наличия ближнего порядка в аморфных телах плотность колебат. состояний в них близка к плотности колебат. состояний кристаллов.

Динамич. теория кристаллич. решётки позволила объяснить упругие свойства Т. т., связав значения статич. модулей упругости с силовыми константами. Тепловые свойства — температурный ход теплопёмкости (см. *Дебая закон теплопёмкости*, *Дебая температура*), коэф. теплового расширения и теплопроводность — как свойства газа фононов (в частности, температурный ход теплопёмкости) объясняются как результат изменения с темп-рой числа фононов и длины их свободного пробега. Оптич. свойства, напр. поглощение фотонов ИК-излучения, объясняются резонансным возбуждением оптич. ветви колебаний кристаллич. решётки — рождением оптич. фононов (см. также *Динамика кристаллической решётки*).

Т. т. различаются темп-рами Дебая  $\theta_D$ , отделяющими область высоких темп-р ( $T > \theta_D$ ), где колебат. движение атомов (фононы) можно описывать, не выходя за пределы классич. физики, от квантовой области. При  $T > \theta_D$  число фононов линейно растёт с темп-рой, а при  $T < \theta_D$  (в квантовой области) — стремится к 0 как  $T^3$  при  $T \rightarrow 0$  К. При  $T = 0$  К в Т. т. вовсе нет фононов. При  $T > \theta_D$  большая часть тепловой энергии Т. т. есть энергия газа фононов. Как правило,  $\theta_D < T_{\text{пл}}$  (исключение составляют твёрдый Не и др. затвердевшие инертные газы).

В процессе колебания кинетич. энергия частицы в результате флуктуаций может превысить глубину потенциальной ямы, в к-рой она движется. Это означает, что частица способна «оторваться» от своего положения равновесия. Обычно вероятность  $W$  такого процесса при комнатной темп-ре мала:

$$W = W_0 \exp(-\mathcal{E}/kT). \quad (1)$$

Здесь  $W_0 = 10^{12} - 10^{13} \text{ с}^{-1}$  — частота колебаний атома в потенциальной яме;  $\mathcal{E}$  порядка энергии связи, рассчитанной на одну частицу ( $\mathcal{E} \sim kT_{\text{пл}}$ ). Поэтому все процессы в Т. т., сопровождающиеся переносом вещества (диффузия собственных и чужеродных атомов), идут сравнительно медленно. Только вблизи  $T_{\text{пл}}$  скорость этих процессов велика. Коэф. диффузии, пропорц.  $W$ , существенно зависит от состояния кристаллич. решётки. Пластич. деформация обычно «разыгryвает» кристалл, снижает энергию связи, потенц. барьеры, разделяющие равновесные положения, и поэтому увеличивает вероятность «перескоков» атомов, увеличивает коэф. диффузии  $D$ .

В твёрдом Не возможно туннельное «просачивание» атомов из одного положения равновесия в другое. Эта *квантовая диффузия* приводит к тому, что коэф. диффузии  $D \neq 0$  при  $T = 0$  К. Делокализация атомов, связанная с туннельными переходами, превращает примесные атомы и вакансии в своеобразные квазичастицы (примесоны, вакансоны). Они определяют свойства квантовых кристаллов.

**Электроны в Т. т.** Сближение атомов в Т. т. на расстояния порядка размеров самих атомов приводит к тому, что валентные электроны теряют связь с определ. атомами и движутся по всему Т. т. Дискретные атомные уровни энергии расширяются в полосы (энергетич. зоны), причём зоны разрешённых энергий могут быть отделены друг от друга зонами запрещённых энергий, но могут и перекрываться. Индивидуальность зон сохраняется и при их перекрытии: состояния электронов с одной и той же энергией, но принадлежащие разным зонам, различны. Глубинные атомные уровни расширяются совершенно незначительно, и состояние глубинных электронов в атомах Т. т. такое же, как в свободном атоме.

В кристаллах состояние электрона в зоне благодаря периодичности действующих на него сил определяется квазимпульсом  $p$ , а энергия электрона в зоне  $\epsilon_s$  — периодич-

фция квазимпульса:

$$\epsilon_s(p) = \epsilon_s(p + 2\pi b), \quad (2)$$

где  $s$  — номер зоны (см. *Блоховские электроны*, *Зонная теория*). Соотношение (2) наз. законом дисперсии.

В аморфных телах квазимпульс ввести нельзя. Строго запрещённых зон энергии в аморфных телах нет, однако есть квазизапрещённые области, где плотность состояний меньше, чем в разрешённых зонах. Движение электрона с энергией из квазизапрещённой области локализовано, из разрешённой зоны — делокализовано (см. *Неупорядоченные системы*).

В соответствии с *Паули принципом* в каждом энергетич. состоянии может находиться не более двух электронов (с разными проекциями спина). Поэтому в каждой энергетич. зоне кристалла может поместиться не более  $2N$  электронов, где  $N$  — число уровней в зоне, равное числу элементарных ячеек кристалла. При  $T = 0$  К все электроны занимают наиб. низкие энергетич. состояния. Существование Т. т. с разл. электрич. свойствами связано с характером заполнения электронами энергетич. зон при  $T = 0$  К. Если все зоны либо полностью заполнены электронами, либо пусты, то такие Т. т. не проводят электрич. ток, т. е. являются *диэлектриками* (изоляторами). Т. т., имеющие зоны, частично заполненные электронами, — проводники электрич. тока — металлы (проводники). *Полупроводники* отличаются от диэлектриков малой шириной запрещённой зоны  $\mathcal{E}_g$  между последней заполненной (валентной) зоной и первой свободной (зоной проводимости). Т. т. с аномально малым перекрытием валентной зоны и зоны проводимости наз. *полуметаллами*. Существуют *бесщелевые полупроводники*, зона проводимости к-рых примыкает к валентной зоне.

Наличие дефектов и примесей в кристалле приводит к возникновению дополнит. примесных энергетич. уровней, располагающихся в запрещённой зоне. У полупроводников эти уровни часто расположены очень близко либо от валентной зоны, либо от зоны проводимости.

Энергия, отделяющая занятые состояния от свободных (т. н. *ферми-энергия*), у металлов расположена в разрешённой зоне; ей соответствует изоэнергетич. поверхность, называемая *ферми-поверхностью*. Она выделяет область занятых электронных состояний в пространстве квазимпульсов. У полупроводников ферми-энергия  $\mathcal{E}_F$  (значение хим. потенциала электронов при  $T = 0$  К) расположена в запрещённой зоне и носит несколько формальный характер (см. *Химический потенциал*). У бесщелевых полупроводников она совпадает с границей, отделяющей валентную зону от зоны проводимости.

Энергетич. зона, в к-рой не заняты состояния с энергией, близкими к максимальной, проявляет себя как зона, содержащая положительно заряж. частицы — дырки. Возбуждение электрона в зону проводимости сопровождается образованием свободного места — дырки в валентной зоне. Электроны частично заполненных зон (электроны проводимости) и дырки являются носителями заряда в Т. т.

Электронная система Т. т. порождает и более сложные образования: в полупроводниках — *экспонты* Ванье — Мотта и Френкеля и поляроны; в сверхпроводящих металлах — куперовские пары (см. *Купера эффект*). Кроме того, по электронной системе Т. т. могут распространяться волны плазменных колебаний; им соответствуют квазичастицы — *плазмоны* (см. *Плазма твёрдых тел*).

**Электронные свойства Т. т.** Кристаллы, имеющие только заполненные и пустые электронные энергетич. зоны, ведут себя в электрич. поле как диэлектрики (изоляторы). Первый возбуждённый уровень находится на конечном расстоянии от основного, причём ширина запрещённой зоны  $\mathcal{E}_g$  велика. Делокализация электронов в таких Т. т. не играет роли, диэлектрики можно считать состоящими из разделённых в пространстве атомов, молекул или ионов. Влияние электрич. поля сводится к сдвигу зарядов и приводит к поляризации диэлектриков (подробно см. в ст. *Диэлектрики*, *Диэлектрическая проницаемость*).