

при расчёте термодинамич. характеристик кристалла, она определяет температурную зависимость тепловых характеристик кристалла (теплоёмкости, теплопроводности и др.) при низких темп-рах.

Интенсивность тепловых колебаний термодинамически равновесного кристалла зависит от отношения его темп-ры  $T$  к Дебай температуре  $\theta_D \sim \hbar \omega_m$ . При высоких темп-рах ( $T \gg \theta_D$ ) ср. квадрат смещения любого атома  $\langle u^2 \rangle$  пропорционален  $T$ . В соответствии с неопределённостей соотношением при  $T=0$  К,  $\langle u^2 \rangle = \langle u^2 \rangle_0 \sim$

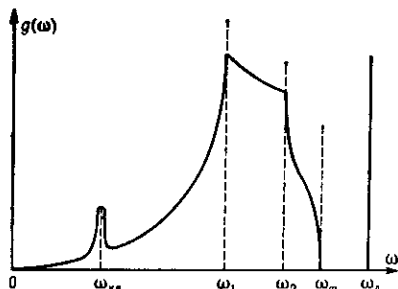


Рис. 3. Схематический вид графика  $g(\omega)$  для одной ветви акустических колебаний;  $\omega_1$  и  $\omega_2$  — положения особенностей ван Хофа,  $\omega_{kl}$  — локальная частота,  $\omega_{kh}$  — квазилокальная частота.

$\sim \hbar / m \omega_m$ . Отличная от нуля величина  $\langle u^2 \rangle_0$  связана с квантовым характером движения атомов и определяет квадрат амплитуды т. н. нулевых колебаний. Условием устойчивости кристаллич. состояния является требование  $\langle u^2 \rangle_0 \ll a$ . Это требование не выполняется в т. н. квантовых кристаллах, динамика к-рых обладает рядом особенностей. Напр., в гелии нулевые колебания столь велики, что он остаётся жидким вплоть до абс. нуля и затвердевает только под давлением.

При квантовом описании малых колебаний кристалла каждому нормальному колебанию с вектором  $k$  можно сопоставить квазичастицу с квазимпульсом  $p = \hbar k$  и энергией  $\mathcal{E} = \hbar \omega$  (см. Корпускулярно-волновой дуализм). Эти квазичастицы наз. фононами и являются элементарными возбуждениями (квантами) поля упругих колебаний кристалла. Слабо возбуждённое состояние кристалла в термодинамич. отношении эквивалентно разреженному бозе-газу фононов, что позволяет для описания тепловых и электрич. свойств кристалла использовать методы статистич. механики идеального бозе-газа. В частности, решёточная теплоёмкость кристалла вычисляется как теплоёмкость газа фононов. Теплопроводность диэлектрич. кристалла определяется кинетикой фононов, рассеивающихся друг на друге и на дефектах кристаллич. решётки. В металлах рассеяние электронов на фононах даёт основной вклад в электросопротивление.

**Нелинейные эффекты.** В действительности колебания кристалла не являются строго гармоническими. Несмотря на малость ангармонизма, при слабых возбуждениях нормальные колебания кристалла оказываются связанными друг с другом (фононы образуют неидеальный газ, т. е. взаимодействуют между собой), а закон дисперсии оказывается зависящим от темп-ры. Наличие ангармонизма (взаимодействие между фононами), в частности, объясняет тепловое расширение кристалла.

При сильном возбуждении смещения атомов не малы, и описывающие их ур-ния становятся нелинейными. В таких условиях возможны движения, существенно отличающиеся от гармонич. колебаний. Импульсная макроскопич. нагрузка вызывает в кристалле ударную волну. Импульсный нагрев может создать тепловую солитон — особый тип коллективного локализованного возбуждения, способного перемещаться с большой скоростью по кристаллу. Если же интенсивное внеш. воздействие сосредоточено на одном атоме (напр., удар быстрой частицы по поверхности кристалла), то сообщённый крайнему атому импульс может передаваться на большие расстояния вдоль плотно упакованного

атомного ряда, в чём проявляется фокусирующее действие кристаллич. решётки (см. Теней эффект, Каналирование заряженных частиц).

Динамич. нелинейность кристалла проявляется при структурных фазовых переходах (напр., в сегнетоэлектриках). Частота нек-рого оптич. фонона зависит от темп-ры и при темп-ре фазового превращения обращается в нуль, приводя к перестройке элементарной ячейки кристалла.

**Колебания кристалла с дефектами.** На Д. к. р. существенно влияют дефекты решётки, изменяющие в ур-нии (1) массу  $m$  частицы (дефекты-примеси) и элементы матрицы  $\alpha$  (точечные и протяжённые дефекты). Нормальные колебания реального кристалла с дефектами уже не являются плоскими волнами, как (2). Среди нормальных мод могут появиться колебания, полностью локализованные вблизи дефекта (локальные колебания). Им отвечают частоты, лежащие выше предельной частоты идеального кристалла или попадающие в запрещённые зоны (рис. 3). Если имеется много однотипных точечных дефектов, то локальное колебание на одном дефекте может «перескочить» на другой (как при резонансе слабо связанных маятников). В таком случае дефектный кристалл обладает примесной зоной частот колебаний.

Локальные колебания протяжённых дефектов (напр., дислокации или дефекта упаковки) распространяются вдоль них в виде волн, не проникающих в объём кристалла и отличающихся законом дисперсии от объёмных волн. Таковы колебания у свободной поверхности твёрдого тела (Рэлея волны).

Наряду с локальными колебаниями могут существовать т. н. квазилокальные колебания, к-рые охватывают весь кристалл, но при к-рых амплитуда колебаний дефекта значительно превосходит амплитуду колебаний атомов в объёме. Частоты таких колебаний попадают в полосы частот идеального кристалла и обычно оказываются расположенными вблизи краёв этих полос. Плотность колебаний имеет узкий резонансный пик на квазилокальной частоте (рис. 3).

Как локальные, так и квазилокальные колебания проявляются в возникновении дополнит. линий в спектрах поглощения ИК-излучения (см. Инфракрасная спектроскопия), в особенностях упругого рассеяния нейтронов (см. Нейтронография) и мессбауэровских спектров (см. Мессбауэровская спектроскопия).

**Динамика дефектов.** Точечные дефекты типа примесей, вакансий или междоузельных атомов способны перемещаться в кристалле путём диффузии. Но классич. диффузию нельзя считать динамич. процессом, т. к. очередной скачок дефекта имеет случайное направление и только усреднение по большому числу дефектов может дать нек-рую направленность их движению. Иначе могут вести себя точечные дефекты в квантовом кристалле, когда для дефекта появляется возможность перехода из одного положения в соседнее путём квантового туннелирования (см. Туннельный эффект). В результате дефект может превратиться в квазичастицу — дефектон, свободно перемещающуюся в кристалле.

Междоузельный атом приобретает способность к механич. перемещению в т. н. краудионной конфигурации даже в классич. кристалле (см. Краудион). «Лишний» атом оказывается как бы распределённым между неск. узлами плотно упакованного атомного ряда и потому легко перемещается вдоль этого направления.

Чисто механич. перемещение (скольжение) характерно для специфического линейного дефекта — дислокации. Смещение её линии по плоскости скольжения не нарушает сплошности кристалла, а потому происходит сравнительно легко. Движение дислокации всегда связано с неупругим изменением формы кристаллич. образца, поэтому дислокация является элементарным носителем пластичности кристалла. Атомная перестройка, сопровождающая перемещение дислокации, требует не очень больших нагрузок, и в этом причина