

С помощью фононов рассеяние носителей заряда на тепловых колебаниях решётки можно описать на основе корпускулярных представлений. Обычно рассматривается подсистема, состоящая из свободных квазичастиц — носителей заряда, сталкивающаяся с подсистемой свободных фононов, что порождает квантовые переходы в системе. Строго говоря, следует учесть также кулоновское взаимодействие в подсистеме зарядов и ангармонич. взаимодействие в подсистеме фононов и др. факторы, влияющие на времена жизни квазичастиц и ограничивающие применимость простой концепции газов квазичастиц, сталкивающихся между собой.

Энергия Э.-ф. в простейшего вида линейно зависит от деформации, возникающей при акустич. и оптич. колебаниях решётки. Ниже приводятся выражения для этой энергии, основанные на разл. физ. представлениях относительно характера взаимодействия электронов с решёткой.

Блоховское взаимодействие. Простейший вид Э.-ф. в металлах, согласно к-рому решётка металла рассматривается как статич. пространственно-периодич. поле $V(x)$, а все электроны движутся независимо, подчиняясь одноэлектронному ур-нию Шрёдингера,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi_k(x) + V(x) \Psi_k(x) = E_k \Psi_k(x),$$

где $\Psi_k(x)$, E_k — собств. состояние и соответствующая собств. энергия электрона. Потенциал $V(x)$, равный сумме потенциалов отд. ионов, обладает периодичностью решётки

$$V(x) = V(x + n_1 a + n_2 b + n_3 c),$$

где a, b, c — базисные векторы решётки.

В отсутствие к.-л. нерегулярностей решётки электроны не испытывают никакого рассеяния. При тепловом движении ионов возникает поле смещений ионов $u(x)$ от их положений равновесия. Согласно Блоху, при движении ионов происходит деформация плотности заряда электронного вокруг иона, причём действующий на электрон потенциал $V_d(x')$ в точке $x' = x + u(x)$ деформированной решётки совпадает с потенциалом $V_n(x)$ в точке x недеформированной решётки, т. е. $V_d(x + u(x)) = V_n(x)$. Тогда действующий на электрон возмущающий потенциал в линейном по смещению ионов приближении равен

$$V_1(x) = V_d(x) - V_n(x) \approx -u(x) \nabla V(x).$$

Наряду с концепцией Блоха существует концепция Нордгейма жёстких ионов, согласно к-рой окружение движущихся ионов почти не меняется, когда они совершают тепловые колебания, в этом случае вид действующего на электрон возмущающего потенциала будет иным. Гамильтониан Э.-ф. в строится на основании полученного одноэлектронного оператора возмущения с помощью правил для аддитивных квантовомеханич. величин (см. ниже), причём в блоховской модели существ. значение имеет поле продольных смещений решётки.

Метод потенциала деформации Бардина — Шокли. Э.-ф. в ковалентном полупроводнике можно найти, если считать концентрацию носителей заряда малой и пренебречь их взаимодействием между собой. Если в таком кристалле возникает небольшая статич. деформация, описываемая (в континуальном приближении) вектором смещения $u(x)$, то соответствующий тензор деформаций имеет компоненты

$$u_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial u_\nu}{\partial x_\mu} \right),$$

зависящие от координаты x элемента объёма. Обозначим через $E_0(k)$ зонную энергию электрона до деформации среды. При малых концентрациях носителей представляет интерес область волновых векторов, близких к экстремумам энергетич. зон, где предполагается справедливым приближение эфф. массы (1). В присутствии пространственно-неоднородной деформации энергия электрона приобретает плавную зависимость от x вида

$$E(k, x) = E_0(k) + C \operatorname{div} u(x) \quad (5)$$

при условии, что $E_0(k)$ имеет сферически-симметричный вид [в противном случае к правой части (5) следует добавить слагаемое, содержащее сдвиговые деформации]. Величина $\operatorname{div} u(x)$ описывает относит. изменение объёма системы, возникающее только при деформациях, обусловленных акустич. фононами, возникают дальнедействующие электростатич. потенциалы, не принимаемые здесь во внимание (см. ниже).

Гамильтониан Э.-ф. в. принимает вид

$$H_{e-ph} = \int dx \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \Psi_{\sigma}(x) C \operatorname{div} u(x), \quad (6)$$

где σ — спиновые индексы, $\Psi_{\sigma}^{\dagger}, \Psi_{\sigma}$ — электронные операторы рождения и уничтожения соответственно. Разложим эти операторы по блоховским ф-циям и воспользуемся разложением (4) оператора смещений $u(x)$. Поскольку $\operatorname{div} u(x)$ содержит скалярное произведение $ke_{\mu}(k)$, равное нулю для поперечных нормальных колебаний, вклад в (6) даёт лишь продольная фононная мода. Окончательно для Э.-ф. в. получаем

$$H_{e-ph} = \sum_{kk'q\sigma} A_q C_{k\sigma}^{\dagger} C_{k\sigma} (a_q - a_{-q}^{\dagger}), \quad A_{-q}^{\dagger} = -A_q, \quad (7)$$

где квазиволновые векторы электронов и фононов связаны между собой законом сохранения $k' = k + q$ для нормальных процессов рассеяния и $k' = k + q + K$ (где K — вектор обратной решётки) для процессов переброса Пайерлса. Гамильтониан Э.-ф. в. H_{e-ph} описывает процессы рассеяния, при к-рых уничтожаются электрон и фонон с квазимпульсами $\hbar k$ и $\hbar q$ соответственно и рождается электрон с квазимпульсом $\hbar k'$. Второй член гамильтониана Э.-ф. в. описывает процесс уничтожения одного электрона с квазимпульсом $\hbar k$ и рождения двух частиц — фонона и электрона с квазимпульсами $-\hbar q$ и $\hbar k'$ соответственно. Т. о., благодаря Э.-ф. в. электронные состояния всегда сопровождаются появлением фононов. Реальной частицей является не свободный блоховский электрон (или дырка), а электрон (дырка), окружённый облаком продольных акустич. фононов. Произошла вторичная перенормировка свойств электрона — на этот раз благодаря фононам. Эта новая квазичастица наз. *поляроном*, хотя первоначально этот термин был введён для обозначения электрона, окружённого облаком продольных оптич. фононов в ионных кристаллах.

Процессы столкновения квазичастиц характеризуются также законом сохранения энергии

$$E(k) - E(k') \pm \hbar \omega_q = 0,$$

к-рый выполняется для реальных частиц, существовавших в начале и в конце процесса взаимодействия (см. *Рассеяние носителей заряда* в кристаллических твёрдых телах).

Взаимодействие с оптическими фононами. Оптич. колебания кристаллич. решётки сопровождаются возникновением дипольных моментов и поляризацией среды. В длинноволновом пределе кристаллич. решётку можно рассматривать как сплошную среду с непрерывным распределением поляризации $p(x)$, к-рая совершает колебания с частотами оптич. фононов. Энергия взаимодействия заряда e , находящегося в точке x , с дипольным моментом $p(x)$, находящимся в точке x' , равна

$$e(x - x') p(x') / |x - x'|^3.$$

С учётом плотности пространств. распределения заряда

$$\rho(x) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \Psi_{\sigma}(x) \text{ энергия Э.-ф. в. принимает вид}$$

$$H_{e-ph} = e \iint dx dx' \frac{(x - x') p(x')}{|x - x'|^3} \rho(x) = e \iint dx dx' \frac{(-\operatorname{div} p(x'))}{|x - x'|} \rho(x). \quad (9)$$

Повторяя применительно к $\operatorname{div} p(x)$ рассуждения, связанные с $\operatorname{div} u(x)$ в ф-ле (6), убеждаемся, что в Э.-ф. в. дают вклады только продольные волны. Следовательно, в длинноволновом пределе реализуется взаимодействие электронов только с продольными оптич. фононами.