

СОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ**III СОВЕЩАНИЕ ПО ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

С 2 по 9 апреля 1959 г. во Львове проходило III совещание по теории полупроводников, созданное Комиссией по полупроводникам АН СССР и Комиссией по полупроводникам АН УССР совместно со Львовским государственным университетом им. И. Франко.

В совещании приняли участие более 200 представителей многочисленных научных учреждений Москвы, Ленинграда, Киева, Свердловска, Харькова, Львова, Минска, Тбилиси, Тарту и др. Всего было представлено 86 докладов, из которых 37 заслушано на 7 пленарных заседаниях.

Перед участниками совещания выступил секретарь Львовского обкома КП Украины тов. Ф. Т. К о в а л ь. Ф. Т. Коваль остановился на задачах, поставленных XXI съездом КПСС перед советским народом и, в частности, перед людьми науки и культуры, сделал обзор экономических и культурных достижений в Западных областях Украины и познакомил участников совещания с задачами, стоящими перед трудящимися Львовщины в связи с семилетним планом.

От имени ректората Львовского госуниверситета собравшихся приветствовал проректор проф. А. И. Ю р ж е н к о. Открывая совещание, проф. С. И. П е к а р кратко охарактеризовал развитие физики полупроводников в Советском Союзе за два с половиной года, протекшие со времени II совещания по теории полупроводников, и отметил значительный рост исследований по теории полупроводников и существенное увеличение числа физиков, работающих в этой области, в особенности за счет выдвижения молодых ученых.

Многоэлектронная теория твердого тела была представлена большой группой докладов. Доклад С. В. В о н с о в с к о г о, М. Ш. Г и т е р м а н а, Г. И. Г у с е в а, Г. Г. Т а л у д а «К многоэлектронной трактовке экситоновых возбуждений» был посвящен выделению из общего гамильтониана системы взаимодействующих электронов кристалла различных видов элементарных возбуждений и обсуждению их связи с полученными ранее видами возбуждений. Рассмотрение ведется методом коллективных координат и импульсов. В качестве коллективных координат  $Q_k$  выбираются фурье-компоненты электронной плотности, в представлении вторичного квантования

$$Q_k = \sum_{\alpha\alpha'} Q_k(\alpha, \alpha') a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha'}$$

Коллективный импульс

$$\pi_k = -i\hbar \sum_{\alpha\alpha'} Q_k'(\alpha, \alpha') a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha'}$$

Из  $Q_k$  и  $\pi_k$  строятся бозе-операторы  $b_k^{\dagger}$ ,  $b_k$ . Гамильтониан разлагается в ряд по степеням  $b_k^{\dagger}$ ,  $b_k$ . Диагонализация гамильтониана проводится в приближении эффективной массы. Определяется энергетический спектр плазменных и экситонных колебаний. Исследуется также спектр колебаний во внешних полях. Учет электрон-фононного взаимодействия в случае ионного кристалла приводит к понижению энергии активации экситонных возбуждений и росту их эффективной массы. Во внешнем однородном электрическом поле имеет место понижение порядка эффекта Штарка для экситонов по сравнению с обычным эффектом смещения уровней в изолированных атомах.

В докладе В. И. Ч е р е п а н о в а и В. С. Г а л и ш е в а изложены результаты работы, целью которой был вывод правил отбора для оптических экситонных переходов в дипольном и квадрупольном приближениях. Оптические правила отбора были получены ранее<sup>1</sup>, но только для орбитального квантового числа экситона в дипольном приближении. В случае экситонов необходимо принимать во внимание пространственную дисперсию; поскольку дипольное приближение пренебрегает этой

зависимостью, учитывается также и квадрупольное приближение. Показано, что потенциальная энергия взаимодействия электрона и дырки имеет вид

$$V(\beta) = -\frac{e^2}{\beta} \Phi(\kappa\beta),$$

где  $\Phi(x)$ —интеграл вероятности. При больших  $\beta$  она приобретает кулоновский вид. Для малых  $\beta$  нет соответствия кулоновскому закону, что приводит к снятию вырождения энергии по орбитальному квантовому числу. Правила отбора в дипольном приближении могут быть получены по обычной схеме; они оказались следующего вида:

$$k=0; \quad l=1; \quad m=0, \pm 1$$

( $l$ —орбитальное,  $m$ —магнитное квантовые числа).

Правила отбора для оптических экситонных переходов в квадрупольном приближении

$$k=0; \quad l=0,2; \quad m=0, \pm 1, \pm 2.$$

Учет квадрупольных переходов содержит возможность объяснения «тонкой» структуры экситонного спектра в закиси меди, наблюдавшейся Гроссом с сотрудниками<sup>2</sup>. Как указал в дискуссии Ю. А. Фирсов, гораздо большее расщепление энергии по орбитальному квантовому числу  $l$  получается при учете характера симметрии задачи.

Расчет теплопроводности экситонов дан в докладе Е. Н. Агафоновой, И. А. Коруновой «Учет влияния бозевских возбуждений на теплопроводность атомных полупроводников». Для электронной части теплопроводности, согласно экспериментальным работам, соблюдается закон Видемана—Франца. Однако в некоторой области температур наблюдается добавочная теплопроводность  $\kappa'$ , не зависящая от концентрации

носителей тока и изменяющаяся с температурой по закону  $\kappa' \sim \exp\left(-\frac{B}{kT}\right)$  ( $B \ll$  ширины запрещенной зоны). Дается качественное объяснение теплопроводности атомных полупроводников (в частности, члена  $\kappa'$ ) с единой точки зрения в рамках многоэлектронной модели. По методу<sup>3</sup> выделяются бозевские и фермиевские электронные возбуждения. Перенос энергии, осуществляемый квазичастицами всех типов, рассчитывается с помощью кинетических уравнений. Та часть теплопроводности, которая удовлетворяет закону Видемана—Франца, обязана фермиевским квазичастицам. Участие бозеквазичастиц в переносе энергии дает как раз добавочную теплопроводность  $\kappa'$ .

Новая форма полярной модели кристалла излагалась в докладе А. Е. Глзбергмана «Теория элементарных возбуждений в полупроводниках». Новый метод «переименования» позволяет построить гамильтониан элементарных возбуждений и при последовательном отделении фона приводит к правильной статистике возбуждений и обладает общностью и простотой.

Для атомного кристалла с одним валентным  $s$ -электроном на каждом атоме в фоновом состоянии, если ограничиться только  $s$ -состояниями электронов, возбуждениями будут двойки и дырки. Если гамильтониан кристалла в представлении вторичного квантования записать в виде

$$H = u_0 + \sum_{\alpha\alpha'} L(\alpha, \alpha') a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha'} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha_1\alpha_2\alpha'_1\alpha'_2} F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha'_1, \alpha'_2) a_{\alpha_1}^{\dagger} a_{\alpha_2}^{\dagger} a_{\alpha'_2} a_{\alpha'_1},$$

где индекс  $\alpha$  указывает номер узла решетки, состояние валентного электрона и его спин, то переход к гамильтониану возбуждений осуществляется с помощью канонического преобразования

$$a_{q1/2}^{\dagger} = A\alpha_q^{\dagger} + B\beta_q; \quad a_{q-1/2}^{\dagger} = B\alpha_q^{\dagger} - A\beta_q;$$

$$A = \sqrt{\frac{n}{m+n}}; \quad B = \sqrt{\frac{m}{m+n}},$$

где  $m$  и  $n$ —концентрации фоновых состояний узлов, а  $\alpha$  и  $\beta$ —операторы двоек и дырок соответственно. При этом операторы полярных возбуждений (двоек и дырок) являются операторами фермиевского типа.

Для рассмотрения экситонов Френкеля нужно в гамильтониане учесть операторы рождения и уничтожения  $p$ -состояний, для которых производится «переименование» в операторы состояний узлов

$$a_{qp1/2}^{\dagger} = \eta_q^{\dagger}, \quad a_{qp-1/2}^{\dagger} = \xi_q^{\dagger},$$

а операторы экситонов вводятся при помощи следующих соотношений:

$$T_q^{\dagger} = \eta_q^{\dagger} \beta_q^{\dagger}, \quad S_q^{\dagger} = \xi_q^{\dagger} \beta_q^{\dagger}.$$

При этом операторы  $\beta$  уже не совпадают с операторами истинных дырок. Легко получить выражения операторов  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\eta$ ,  $\xi$  через операторы действительных квазичастиц—

двоек, дырок и экситонов. Операторы дырок имеют квазифермиевский, операторы экситонов—квазибозевский, а операторы двоек—фермиевский характер.

Рассматривается также случай кристалла со спиновонасыщенным фоном (на каждом атоме по два  $s$ -электрона). Учитываются элементарные возбуждения: одиночки, тройки, экситоны. Производится переименование операторов

$$\begin{aligned} a_{qp}^{+1/2} &= \alpha_{q1}^{+}, & a_{qs}^{+1/2} &= \beta_{q1}^{+}, \\ a_{qp}^{+1/2} &= \alpha_{q2}^{+}, & a_{qs}^{-1/2} &= \beta_{q2}^{+}. \end{aligned}$$

При этом операторы экситонов вводятся как произведения типа  $\alpha^{+}\beta^{+}$ . Легко получить формулы, выражающие операторы  $\alpha, \beta$  через операторы действительных квазичастиц. Тройки и одиночки оказываются квазифермиевскими, а экситоны—квазибозевскими.

Аналогичным образом легко рассмотреть смешанный фон, что практически важно для задач о полупроводниках с примесями. Из развитой схемы следует ряд новых результатов, особенно интересных при наличии внешнего магнитного поля.

Во время дискуссии С. И. Пекар заметил, что доложенная теория, так же как и ранее рассматривавшиеся варианты полярной модели, не учитывает зависимости  $p$ -состояния и его энергии от того свободно или занято  $s$ -состояние в данном узле (и наоборот, зависимости  $s$ -состояния от заполнения  $p$ -состояния). А. Е. Глауберман ответил, что неучет корреляции этого типа не влияет на качественные результаты теории и что в случае необходимости ее можно учесть с помощью соответствующего выбора системы базисных функций.

Вопросу возникновения в полупроводниках коллективных («плазменных») эффектов типа наблюдаемых в газовом разряде был посвящен доклад В. Л. Бонч-Бруевича «Некоторые вопросы теории электронно-дырочной плазмы в полупроводниках». Отличие от газового разряда состоит в том, что в полупроводниках концентрации свободных зарядов может быть значительно большей ( $10^{17}$ — $10^{18}$   $\text{см}^{-3}$ ), ее можно сравнительно легко варьировать в довольно широких пределах; тяжелые частицы всегда можно считать неподвижными; всегда есть затухание за счет столкновений с фононами. Имеют место такие основные типы «коллективных» эффектов: а) возникновение новой (по сравнению с идеальным электронным газом) ветви энергетического спектра плазменных колебаний; б) модификация фермионного спектра: как параметры типа эффективной массы, так и сам вид закона дисперсии меняются при учете межэлектронного взаимодействия; в) появление затухания за счет межэлектронного взаимодействия; г) изменение вида функции распределения за счет взаимодействия (в квантовой области); д) экранирование внешнего поля свободными зарядами. Аппарат температурных функций Грина позволяет свести изучение фермионного спектра к решению «эффективного уравнения Шредингера», имеющего формально «одночастичный вид», т. е. в теории сохраняются обычные представления о локальных уровнях, связанных со структурными дефектами. В силу экранированного потенциала взаимодействия электрона с примесным центром число локальных уровней конечно и может исчезнуть при достаточно малом радиусе экранирования. Это открывает возможность управлять в известной мере энергетическим спектром системы, изменяя концентрацию свободных носителей тока и температуры. Параметры типа эффективной массы, энергии ионизации примеси и т. д. зависят от концентрации носителей тока и температуры, т. е. они являются характеристиками не вещества, а образца и представляют собой термодинамические величины (могут испытывать флуктуации). М. Я. Азбель выразил сомнение в существовании области применимости сказанного доклада, ибо длина свободного пробега должна быть достаточно малой, чтобы говорить о взаимодействии. Это же соответствует весьма малым температурам ( $\sim 0,1^{\circ}\text{K}$ ).

Ряд докладов был посвящен специально теории экситонных возбуждений в кристаллах. В докладе С. И. Пекара\*) «Теория электромагнитных волн в кристалле в области экситонного поглощения» результаты предыдущих работ автора<sup>4</sup> обобщались на случай конечного времени жизни возбужденного состояния кристалла и для нескольких полос поглощения света. Учет конечного времени жизни экситона дал возможность получить общие формулы для поглощения и поправки к ранее выведенным формулам дисперсии. При малом и мнимом показателе преломления уравнение Шредингера для экситона неприменимо. Поэтому расчет велся электродинамическим способом. Кристалл рассматривался как совокупность электронов и ядер, взаимодействующих с электромагнитным полем в вакууме. Электромагнитная волна, возмущающая кристалл, вводится как классическое возмущающее поле. Оператор энергии представляется в виде  $\hat{H} + \hat{W}$  ( $\hat{W}$ —оператор взаимодействия с внешним электромагнитным полем). Состояние кристалла, возмущенного светом,

\*) В отличие от других докладов по экситонам С. И. Пекар рассматривает «обобщенный экситон»—нейтральное возбуждение, обладающее одним квазимпульсом.

описывается волновой функцией

$$\psi = \psi^0 + \sum_m C_m \psi_m; \quad |C_m| \ll 1.$$

Правильные начальные условия для  $C_m$  должны учитывать факт, что поглощение света в кристалле сопровождается нагреванием кристалла поглощаемым светом. Поэтому в кристалле появляются поляризационные волны теплового происхождения, амплитуды которых не пропорциональны полю светового возмущения, а зависят от длительности предварительного освещения, т. е. поляризация имеет две части: «тепловую» и «синхронную». Только синхронную часть поляризации возможно описать комплексной диэлектрической постоянной. Экситоны нельзя считать квазичастицами в старом смысле этого слова. При поглощении света возникает так называемый «свето-экситон» (совокупность световых и фононных волн).

Новая запись вектора поляризации приводит к новым явлениям на кривой дисперсии (которые пропадают, если масса экситона  $\rightarrow \infty$ ).

Для предельно длинной экситонной волны найдена зависимость ее энергии от направления распространения. Область поглощения света определяется соотношением  $\hbar\omega \approx \epsilon_0$  (энергия основного состояния кристалла), а не обычным правилом частот Бора  $\hbar\omega = \epsilon$  (энергия возбужденного состояния). Отсюда следует, что экспериментальное исследование частоты  $\omega$ , при которой поглощение максимально, позволяет определить с помощью соотношения  $\hbar\omega = \epsilon_0$  величину  $\epsilon_0$ , которая, вообще говоря, меньше энергии экситона  $\epsilon$ . В результате учета конечного времени жизни экситона показатель преломления приобретает комплексную добавку, которая определяет затухание монохроматической волны в пространстве. Но как было показано<sup>4</sup>, в кристалле возникает несколько плоских волн, каждая из которых имеет свой показатель преломления и коэффициент затухания. Нет экспоненциального затухания для суммарной интенсивности. Феноменологическое понятие коэффициента поглощения света теряет смысл.

Новая теория электромагнитных волн в кристаллах в области экситонного поглощения, развитая С. И. Пекаром, была применена к кубическим кристаллам с изотропной эффективной массой экситона в докладе И. М. Дыкмана, С. И. Пекара «Световые волны в кристаллах в области экситонного поглощения и примесный фотоэффект». Показано, что в случае, когда частота света близка к  $\omega_0$ , где  $\hbar\omega_0$  определяется наименьшей энергией экситонного состояния, амплитуды поперечных волн, возникающих в кристалле, оказываются малыми. Доминирующей является продольная волна, амплитуда которой имеет тот же порядок величины, что и амплитуда падающей. В области частот, в которой показатель преломления обыкновенной волны значительно меньше единицы, амплитуды нормальной поперечной и продольной волны могут значительно превышать амплитуду падающей волны. В указанной области должно иметь место резкое возрастание числа фотоионизаций, следовательно и величины фототока. Кроме того, величина фототока должна иметь в этой области частот резкую зависимость от угла падения и поляризации. Это явление может быть одним из механизмов экситонного примесного фотоэффекта, наблюдавшегося Жузе и Рывкиным, Апкером и Тафтом и др.

В ходе дискуссии В. М. Агранович заметил, что результаты могут немного измениться, если учесть поглощение света. Ю. М. Попов указал на необходимость сравнения результатов авторов с экспериментальными данными.

В докладе В. А. Москаленко «Энергия экситона в ионных кристаллах» рассматривалось вычисление статистической суммы экситона в ионных кристаллах. После выполнения суммирования по бозонным амплитудам фононного поля статистическая сумма рассматриваемой системы представлена в виде континуального интеграла

$$Z = \chi \int \int a R_0 dR_\beta dr_0 dr_\beta \delta(R_0 - R_\beta) \delta(r_0 - r_\beta) \int e^S D\mathbf{r} D\mathbf{R},$$

где  $S$  представляет собой сумму кинетических энергий электрона и дырки, энергий их самовоздействия посредством фононного поля и энергии электрического и косвенного взаимодействия электрона и дырки. На основе вариационной теоремы  $Z$  заменяется более простым выражением, допускающим точное функциональное интегрирование. В результате вычислений получено выражение для статистической суммы системы при произвольных значениях экситонно-фононного взаимодействия и при произвольных температурах. Полученные выражения дали в различных предельных случаях результаты предыдущих работ по теории экситона.

Теория экситона большого радиуса, учитывающая как кулоновское, так и резонансное взаимодействие, была построена в докладе Э. М. Рашба «Эффект резонансной передачи возбуждения в теории экситона большого радиуса». Существуют два механизма передвижения экситонов: резонансный (экситоны Френкеля) и обменный (экситоны Мотта). В действительности передвижение более сложно; нужно учитывать оба механизма. В теории Ванье-Мотта не учитывалась способность электронно-дырочных пар к аннигиляции и рождению. Здесь вводятся аннигиляционные члены. Переход к континууму, выполненный при определенных предположениях, приводит к интегро-дифференциальному уравнению, содержащему нерелятивистский контактный член.

В докладе А. Г. Самойловича, А. А. Липника «Связывание и распад экситона Мотта» приводились результаты вычислений вероятностей связывания  $p_c$  и распада  $p_r$  экситона на акустических фононах, в широком интервале температур (начиная с крайне низких). Расчет велся методом обычной теории возмущений, в приближении эффективной массы. Для параметров, примерно соответствующих Ge, в интервале от нуля до сотен градусов Кельвина  $p_c$  возрастает, что объясняется ростом числа фононов, необходимых для связывания. Этот фактор превалирует (в указанном интервале) над влиянием роста кинетической энергии электронов и дырок. Вероятность распада можно связать с вероятностью связывания и оценить время жизни экситона по отношению к распаду. Для Ge при  $4^\circ \text{K}$   $\tau_p \sim 10^{-8} \text{ сек}$ , при  $100^\circ \text{K}$   $\tau_p \sim 3 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ .

С. И. Пекар обратил внимание на то, что понятие квантового захвата может оказаться неприменимым, когда захват происходит на больших расстояниях (тогда имеет место классическая диффузия). Как заметил М. И. К а г а н о в, для оценки квантового и классического подхода нужно сравнить радиус экситона с его длиной пробега.

Задача о вычислении длины свободного пробега экситона большого радиуса в полярных кристаллах с кубической симметрией была рассмотрена в докладе А. В. Тулуба «Длина свободного пробега экситона в полярных кристаллах». Обычный аппарат теории возмущений в полярных кристаллах может привести к значительным ошибкам, так как взаимодействие электрона с оптическими фононами не является слабым. Существенно учесть взаимодействие экситона с фононами в волновых функциях экситона, которые относятся к начальным и конечным состояниям. Вычисление амплитуды рассеяния производится по методу Лоу.

Если эффективные массы электрона и дырки совпадают (как это, например, имеет место в случае записи меди), сечение рассеяния в нуль не обращается. Это связано с тем, что хотя экситон в целом и будет электрически нейтральной системой, но он вызывает деформацию решетки как за счет взаимодействия электрона, так и за счет взаимодействия дырки со средой. В результате фононы испытывают рассеивание на деформированной решетке и сечение рассеяния будет конечным. Обычная теория возмущений не может учесть этого эффекта.

Сравнивалась также теория  $F$ -центров больших радиусов с теорией экситонов. Показано, что для учета статической поляризации от вакансии недостаточно ввести диэлектрическую постоянную  $\epsilon$  в оператор кулоновской энергии. Учет статической поляризации существен для возбужденных состояний  $F$ -центра.

Ряд докладов был посвящен оптическим свойствам полупроводников.

Теория поглощения длинноволнового излучения в кристаллах рассматривалась в докладе Л. Э. Гуревича, З. И. Ур и ц к о г о «К теории инфракрасного поглощения кристаллов». При частотах  $\omega < \omega_0$  (порог фотоэффекта) возможно поглощение: а) непосредственно колебаниями решетки; б) путем образования виртуальных возбуждений, аннигилирующих с образованием фононов; в) свободными носителями; г) экситонами. Излучалось поглощение, связанное с возбуждением световым квантом виртуальной электронно-дырочной пары, аннигилирующей затем с образованием одного или нескольких фононов. Для этого авторами был разработан метод теории возмущений в представлении взаимодействия для нерелятивистского взаимодействия электронов и дырок с фотонами и фононами, на основе аналогий с квантовой электродинамикой. В поглощении оказываются существенными фононы и электроны больших энергий, так что возможна лишь порядковая оценка коэффициента поглощения, которая произведена в приближении линейной дисперсии для акустических фононов и изотропной квадратичной дисперсии для оптических фононов и электронов. Поглощение максимально для двухфононного процесса, следствием чего могут явиться особенности кривой поглощения при частотах, равных сумме максимальных частот двух каких-либо ветвей. Магнитное поле слабо влияет на поглощение. Поглощение свободными носителями рассматривалось при наличии магнитного поля в случае изотропной квадратичной дисперсии носителей. Наиболее существенным оказалось поглощение электроном фотона с испусканием или поглощением одного фонона. Обнаружены также осцилляции коэффициента поглощения в области внутреннего фотоэффекта, которые могут быть объяснены квантованием электронных и дырочных состояний в магнитном поле (экспериментально они изучались Цвердлингом и Лэксом, Гроссом, Захарченей и Павинским <sup>6</sup>).

В докладе А. В. Соколова, В. П. Широковского «К теории оптических свойств полупроводников» определялись две основные величины, характеризующие оптические свойства твердых тел: «световая проводимость»  $\sigma(\omega)$  и поляризуемость  $\alpha(\omega)$ . Первая величина непосредственно связана с поглощательной способностью вещества, тогда как для определения оптических констант  $n$  и  $k$  и отражательной способности  $R$  наряду с  $\sigma(\omega)$  нужно знать и поляризуемость вещества. Поглощение свободными носителями зависит от нарушения периодической структуры кристалла. Так как эти же факторы ответственные за электросопротивление вещества, должна существовать корреляция между электрическими свойствами и поглощением свободными носителями. Для расчета используется обычное кинетическое уравнение. В некоторых кристаллах полоса проводимости или валентная полоса состоит из нескольких перекры-

вающихся полос. В таких случаях наблюдается поглощение инфракрасного излучения, вызванное «междоузельными» переходами свободных носителей. Учет возможности переходов может быть произведен в рамках кинетического уравнения. Наличие смыкания энергетических полос должно приводить к появлению максимумов резонансного типа на кривой поглощения. Наряду с этим рассматривались оптические свойства одноосных полупроводниковых кристаллов, зависящие лишь от переходов электронов из валентной полосы в полосу проводимости. Полученные выражения для  $\sigma(\omega)$  и  $\alpha(\omega)$  показывают, что одноосный кристалл полупроводника является двоякопреломляющим. Это является следствием того, что правила отбора для переходов между валентной полосой и полосой проводимости различны для различных направлений поляризации. Кроме того, предсказывается новый эффект, заключающийся в прозрачности кристалла для излучения, поляризованного вдоль гексагональной оси и идеального отражения для излучения, поляризованного перпендикулярно этой оси.

В докладе О. В. Константинова, В. И. Переля «Эффект пространственной дисперсии при прохождении электромагнитных волн через полуметаллы в сильном магнитном поле» получено общее выражение для электрической и магнитной восприимчивости при учете пространственной дисперсии. С помощью введения матрицы плотности найден средний квантовомеханический ток, состоящий из двух слагаемых. Первое содержит влияние полей, запаздывающих во времени. Второе (ток намагничивания) не содержит запаздывания. Электрическая проводимость и магнитная восприимчивость оказываются связанными. Общее выражение для плотности тока в случае однородной среды было получено Накаджима по методу Кубо<sup>6</sup>. Однако Накаджима не получил выражения для магнитной восприимчивости и ее связи с электропроводностью.

Во время дискуссии М. Я. Азбелъ указал на необходимость учета граничных условий, ибо это аномальный скин-эффект и нужно, чтобы глубина скин-слоя была значительно больше толщины образца. М. И. Каганов заметил, что идея связывания кинетических и термодинамических коэффициентов весьма прогрессивна.

Вопросы кинетики носителей тока, теории процессов переноса и пробоя в полупроводниках были освещены в большой группе докладов.

В докладе А. Г. Самойловича, М. И. Клингера, Л. Л. Корнблита «К статистической теории линейных необратимых процессов» предлагался новый вывод общих выражений неравновесной матрицы плотности системы и средних потоков при воздействии на систему малых «механических» сил; он непосредственно обобщался для обобщенных статистических сил типа градиента температуры (см.<sup>6</sup>). Полученное уравнение движения для матрицы плотности решается, и с помощью обычного определения средних потоков получены общие выражения кинетических коэффициентов  $L_{\mu\nu}^{21}$ . Рассмотрены важные частные случаи переноса в электронно-фононной системе и в вязкой жидкости. В области слабого электронно-фононного рассеяния предложен способ применения теории возмущений, дающий возможность регулярно вычислить вклад любого приближения по малой постоянной электронно-фононной связи  $\alpha$  в определяемый кинетический коэффициент. Определена роль виртуальных переходов и критерий малости его вклада в кинетические коэффициенты в  $\alpha^2$ -приближении. Полученные формулы применены к случаям рассеяния электронов фононами при отсутствии вырождения электронного газа; таким образом получены единые во всей области температур (при слабой связи) выражения электро- и теплопроводности, а также термоэдс ионного кристалла. С помощью определенной неравновесной матрицы плотности строго определена неравновесная функция распределения  $f'(\mathbf{k})$  носителей тока при отличном от нуля электрическом поле. В области слабой электронно-фононной связи при изотропных энергетических спектрах электронов и фононов и при отсутствии вырождения электронов

$$f'(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \tau(\mathbf{k}) v_{\mu}(\mathbf{k}) E_{\mu}(\mathbf{k})$$

$E$  и  $v$ —постоянное электрическое поле и средняя скорость носителя в состоянии  $\mathbf{k}$ ;  $f_0$ —равновесная функция распределения электронов;  $\tau(\mathbf{k})$ —время релаксации электронов в состоянии  $\mathbf{k}$ . Для  $\tau(\mathbf{k})$  получено единое выражение во всей области энергии и температур  $T$ ; оно справедливо и для неупругих соударений.

Доклад Ю. П. Ирихина, Е. А. Турова «К феноменологической теории электропроводности ферромагнитных полупроводников» на основе феноменологической теории ферромагнитных материалов<sup>7</sup> рассматривал энергетический спектр и электропроводность ферромагнитного полупроводника, состоящего из двух подрешеток с нескомпенсированными магнитными моментами  $M_1$  и  $M_2$ . Полагая  $M_1 = M_2$  или  $M_1 = -M_2$ , можно было получить частные случаи ферромагнитного или антиферромагнитного полупроводника соответственно.

Получены следующие типы магнитных аномалий электропроводности: а) аномалии вблизи точки Кюри: при переходе в ферромагнитное состояние имеет место уменьшение энергии активации носителей; б) аномалии в точке компенсации ферромагнет-

тика: имеет место минимум энергии активации; в) в случае сильного взаимодействия носителей тока с магнитными моментами может произойти изменение знака температурного коэффициента электропроводности, т. е. появление металлического характера проводимости при переходе в ферромагнитное состояние и вблизи точки компенсации; г) в случае примесных носителей тока, в отличие от собственной проводимости, может происходить и увеличение энергии активации при переходе в ферромагнитное состояние.

Вопросам рассеяния электронов проводимости был посвящен доклад А. И. Ансельма, И. Г. Ланга «Теория двухфононного рассеяния электронов проводимости в атомных кристаллах». Потенциал взаимодействия электронов проводимости с тепловыми колебаниями атомной решетки, в приближении деформируемых ионов, с точностью до членов, квадратичных в смещениях  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , был взят в виде

$$U(\mathbf{r}) = U_1 + U_2; \quad U_1 = -(\text{grad } V_1 \mathbf{u}) = -\sum_i \frac{\partial V}{\partial x_i} u_i,$$

$$U_2 = \frac{1}{2} (\text{grad grad } V) \quad \text{и} \quad u = \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} u_i u_j,$$

где  $u_i$  и  $x_i$  — прямоугольные составляющие векторов  $\mathbf{u}$  и  $\mathbf{r}$ ,  $V$  — периодический потенциал, действующий на электроны в идеальном кристалле. Двухфононное взаимодействие электронов проводимости с колебаниями решетки осуществляется посредством двух процессов: а) во втором приближении теории возмущений на линейном члене; б) в первом приближении теории возмущений на билинейном члене.

Для того чтобы получить конечный результат для процессов а) необходимо учесть затухание. При этом многофононные процессы не изменяют времени релаксации  $\tau_1$  однофононного рассеяния. Процессы б) выше температуры Дебая приводят к конечному времени релаксации  $\tau_2$  и без учета затухания. При двухфононном рассеянии, в противоположность однофононному, продольные и поперечные акустические колебания играют одинаковую роль. Кроме того, при повышении температуры роль двухфононных процессов по сравнению с однофононными возрастает. Температура, при которой одно- и двухфононные процессы одинаково эффективны, лежит в интервале  $10^2$ — $10^3$  градусов Кельвина.

В докладе М. А. Кривогайца «К теории фононной теплопроводности кристаллов» была рассмотрена фононная теплопроводность твердых растворов при низких температурах (значительно ниже дебаевской). Предполагалось, что главным механизмом рассеяния фононов является рассеяние на концентрационных неоднородностях кристалла. В рассматриваемой области низких температур возбуждены главным образом длинноволновые акустические колебания, вследствие чего возможно макроскопическое рассмотрение задачи. Расчет проводился в приближении упругого изотропного континуума. В случае идеальных растворов коэффициент теплопроводности  $\kappa$  обратно пропорционален произведению  $c(1-c)$ , где  $c$  — концентрация, и абсолютной температуре  $T$ . Величина  $\kappa$  сильно зависит от состояния упорядочения растворов. Особенно сильное влияние корреляции в расположении атомов в растворе на фононную теплопроводность должно наблюдаться в растворах критического состава, закаленных от температуры, близкой к критической температуре на кривой распада. Коэффициент теплопроводности таких растворов, измеренный при низких температурах, должен быть значительно меньше, чем в случае идеальных растворов. Теплопроводность раствора, закаленного в критической точке, оказывается пропорциональной температуре, а не обратной температуре, как вдали от критической точки. Отношение теплопроводности раствора, закаленного из критической точки, к теплопроводности идеального раствора по порядку величины равно  $(kT)^2/(\hbar\omega_m)^2$ , где  $\omega_m$  — максимальная частота акустических колебаний кристалла; т. о. при низких температурах это отношение может быть очень мало. Резкое уменьшение теплопроводности, связанной с акустическими колебаниями решетки, при низких температурах должно иметь место также вблизи критической точки на кривой фазового перехода второго рода. В таких кристаллах в определенной области низких температур существенную роль в теплопроводности могут играть также оптические колебания решетки, частота которых может быть на два порядка меньше обычных частот оптических колебаний.

А. И. Ансельм и В. М. Агранович в ходе дискуссии указали на необходимость интенсивной разработки вопросов теории теплопроводности для выяснения роли интерференции различных механизмов рассеяния и вывода эффективных формул, способных описать эксперимент.

В докладе Ю. М. Попова, В. А. Чуенкова «Зависимость подвижности электронов и дырок в германии и кремнии от напряженности электрического поля при низких температурах» расчет велся с помощью функции распределения электронов (дырок) при низких температурах. Функция распределения была получена путем решения кинетического уравнения, учитывающего действие внешнего электрического поля, рассеяние на колебаниях решетки и на заряженных примесях. Показано, что при

некотором поле  $E=E_0$  подвижность имеет максимум. Такая зависимость подвижности от поля связана с тем, что с ростом напряженности электрического поля растет средняя энергия электронов (дырок), а это в свою очередь приводит к уменьшению вероятности рассеяния на заряженных примесях и увеличению вероятности рассеяния на колеблющихся решетках. При  $E < E_0$  подвижность определяется в основном рассеянием на заряженных примесях; при  $E > E_0$  рассеяние на заряженных примесях становится несущественным.

В докладе М. И. Иглицына, Ю. А. Концегова, К. В. Темко «Расчет времени восстановления проводимости базовой области плоскостного перехода» сообщались результаты вычисления времени восстановления проводимости базовой области плоскостного  $p$ — $n$ -перехода с учетом зависимости времени жизни носителей заряда от уровня инжекции. Система уравнений решалась численным методом на электронной счетной машине. Рассмотрено несколько частных случаев, для которых найдено стационарное и нестационарное распределение неравновесных носителей заряда вблизи  $p$ — $n$ -перехода. Установлена связь между временем восстановления и временем жизни носителей заряда при произвольных уровнях инжекции. Расчет позволяет обосновать распространенную методику экспериментального исследования зависимости времени жизни от уровня инжекции.

Вопросам теории  $p$ — $n$ -переходов был посвящен также доклад Э. И. Адирова и ч. а, Е. М. Кузнецовой «О емкости и электрическом пробое  $p$ — $n$ -переходов». Существующие теории  $p$ — $n$ -переходов опираются на представление о квазидieleктрическом истощенном слое, возникающем в области  $p$ — $n$ -перехода при обратных напряжениях, превышающих несколько  $\frac{kT}{q}$ . Между тем исходное предположение о режиме

истощения  $p$ — $n$ -перехода ( $p \ll N$ ;  $n \ll N$ , где  $N$ —избыточная концентрация доминирующей примеси) не соответствует истинной картине распределения носителей заряда в  $p$ — $n$ -переходах.

Проведенный расчет показал, что режим истощения  $p$ — $n$ -перехода достигается при обратных напряжениях  $|V| \gg \frac{kT}{q} \frac{N_a}{N_g}$ , где  $N_a$  и  $N_g$ —концентрации акцепторов и доноров соответственно в областях  $p$ - и  $n$ -типа. При обратных напряжениях  $|V| \ll \frac{kT}{q} \frac{N_a}{N_g}$  максимальное значение напряженности поля в  $p$ — $n$ -переходе практически не отличается от термодинамически равновесного значения, а так называемая зарядная емкость  $p$ — $n$ -перехода на несколько порядков меньше, чем по формуле Шоттки—Мотта. Физической причиной полученных результатов является существование инверсионного слоя ( $p > N$ ) в полупроводнике  $n$ -типа, представляющего собой одновременно и область высокой проводимости и область высокой напряженности поля. Вследствие высокой концентрации дырок и большой плотности объемного заряда в инверсионной области картина распределения поля и концентраций носителей заряда в  $p$ — $n$ -переходе существенно отлична от картины истощенного слоя, и результаты совпадают с формулами теории Шоттки—Мотта только при больших обратных напряжениях  $V \sim \frac{kT}{q} \ln \frac{N_a}{N_g}$ , разрушающих инверсионный слой. Реактивные свойства  $p$ — $n$ -перехода обусловлены двумя эффектами, вызываемыми изменением напряжения: 1) диффузией неосновных носителей заряда, инжектированных в область квазинейтральности; 2) перестройкой области объемного заряда. С первым из этих эффектов в теории связана диффузионная, а со вторым зарядная (собственная) емкость  $p$ — $n$ -перехода. Анализ показывает неправильность определения собственной емкости  $C = -\frac{dQ}{dV}$  и приводит

к формуле  $C = q \frac{d}{dV} \int n dx$ . Область применимости формулы Шоттки—Мотта для емкости определяется неравенством

$$V \lesssim \frac{kT}{q} \ln \frac{N_g^2}{10n_i^2}.$$

В настоящее время экспериментально установлено, что электрический пробой полупроводников происходит (за исключением очень узких  $p$ — $n$ -переходов) вследствие ударной ионизации электронами (дырками). Рассмотрение этого вопроса с теоретической точки зрения было произведено в докладе В. А. Чуенкова «Теория электрического пробоя полупроводников». Путем решения кинетического уравнения получена функция распределения электронов (дырок) в сильном электрическом поле. С помощью ее показано, что с ростом напряженности электрического поля среднее число ионизаций (на один электрон) в единицу времени растет, а среднее число рекомбинаций падает. Это приводит к тому, что при некотором критическом значении напряженности электрического поля  $E=E_{кр}$  кинетическое уравнение теряет стационар-



ное решение (концентрация электронов и дырок обращается в бесконечность) и наступает электрический пробой полупроводника. В  $p-n$ -переходе рекомбинация не играет роли (время дрейфа электрона через переход гораздо меньше времени жизни), а процессом, уравнивающим ударную ионизацию, является дрейф электронов из области  $p-n$ -перехода. Показано, что критерием пробоя не слишком узких  $p-n$ -переходов является критерий Таунсенда для газов. С помощью найденной функции распределения электронов (дырок) в  $p-n$ -переходе получена зависимость коэффициентов ударной ионизации от напряженности электрического поля и температуры.

Явление ударной ионизации рассматривалось также и в докладе Л. В. К е л д ы ш а «Кинетическая теория ударной ионизации в полупроводниках». Исследовалось влияние процессов ударной ионизации на функцию распределения электронов и дырок в сильном электрическом поле. Показано, что энергетическая зависимость вероятности ударной ионизации вблизи порога существенно различна для кристаллов с малой и большой диэлектрической постоянной, а также рассмотрено решение кинетического уравнения в обоих этих случаях. Получены выражения для равновесного числа носителей в сильном поле, коэффициента ударной ионизации, критического поля и т. д. Найдена зависимость пробивного поля от температуры, толщины образца и закона взаимодействия электронов с решеткой. Установлена связь полученных выражений с известными критериями пробоя Фрелиха и Хипшеля. Показано, что рост электрического поля приводит к уменьшению скорости рекомбинации, в результате чего равновесное число носителей начинает расти с ростом поля задолго до появления ударной ионизации.

Вопросам ударной ионизации был посвящен также доклад Г. В. Г о р д е е в а «Ударная ионизация на  $p-n$ -переходе». Рассматривалось умножение тока вследствие ударной ионизации на  $p-n$ -переходе (коэффициент умножения—отношение плотности тока  $j$  при заданном напряжении к плотности тока насыщения  $j_s$ ). Мак-Кэй и Миллер<sup>8</sup> определяли зависимость скорости ионизации электронами и дырками от поля при известном умножении тока или пробивном напряжении. Здесь ставилась обратная задача. Выведена формула для коэффициента умножения в случае крутого перехода. Исследован вопрос о границах ее применения.

В докладе А. Ю. Л е й д е р м а н а, П. М. К а р а г е о р г и й - А л к а л а е в а «О приложении схемы полупроводника с одним примесным уровнем к объяснению эффектов гашения фотопроводимости и фотоактивации» рассматривался отрицательный фотоэффект в полупроводниках. Изучались два механизма фотоэффекта: экситонный и электронный. В первом случае процесс безынерционный. Так как время жизни экситона отлично от 0, то возрастание концентрации свободных носителей запаздывает. Условие возникновения отрицательного фотоэффекта приводит в этом случае к существованию двух температурных границ. В случае электронного механизма свет возбуждает электроны из валентной зоны на примесной уровень. При этом в валентной зоне образуется дырка. Электрон из зоны проводимости рекомбинирует с этой дыркой, в результате чего уменьшается число свободных носителей—имеет место отрицательный фотоэффект. Характерной особенностью является его безынерционность, а также существование нижней температурной границы. Теория может дать качественное объяснение опытных данных.

Группа докладов была посвящена изучению структуры энергетического спектра носителей тока для конкретных типов кристаллических решеток. Зонная структура полупроводников типа  $A^{III}-BV$  рассматривалась в докладе А. И. Г у б а н о в а и А. А. Н р а н ь я н а «Исследование энергетического спектра полупроводников со структурой сфалерита». Методом эквивалентных орбит получены аналитические выражения зависимости энергии от волнового вектора четырех валентных зон и четырех зон проводимости соединений типа  $A^{III}-BV$ .

Полученные результаты анализировались для установления характерных для всех  $A^{III}BV$  признаков зонной структуры. В частности, установлено, что при переходе от элементов IV группы к  $A^{III}BV$  как внутри 4-валентных зон, так и внутри 4 зон проводимости возникает дополнительная запретная зона, отделяющая 3 зоны от 4-й.

В докладе К. Д. Т о в с т ю к а и И. В. Г в о з д о в с к о г о «Энергетический спектр носителей тока в кристаллах со структурой цинковой обманки» исследован энергетический спектр полярных возбуждений в кристаллах со структурой цинковой обманки на основе многэлектронной модели, предложенной в работе<sup>9</sup>, учитывающей характер связей. Введенный для описания степени асимметрии облака электрона, локализованного на связи, параметр входит в спектр. Присутствие этого параметра увеличивает эффективную массу квазичастиц (носителей тока) и ширину запрещенной зоны.

В докладе В. А. Ч а л д ы ш е в а «Структура энергетического спектра кристаллов с решеткой халькопирита» исследовалась топологическая структура энергетического спектра электронов в кристаллах с решеткой типа халькопирита ( $CuFeS_2$ ). Расчет велся на основе метода, предложенного Бокартом, Смоуховским и Вигнером. Вычислены характеры неприводимых представлений простой и двойной группы симметрии таких

кристаллов. Проанализирован характер соприкосновения энергетических зон и обсужден вопрос о влиянии спин-орбитального взаимодействия. Исследовалась также зависимость  $E(\mathbf{k})$  при различных предположениях о положении границы зоны.

В докладе Е. И. Чеглова «Применение метода эквивалентных орбит к расчету валентной зоны некоторых ковалентных кристаллов» на основе методов теории групп и метода эквивалентных орбит рассматривалась структура валентной зоны ковалентных кристаллов типа теллура и типа висмута. Найдено, что валентная зона кристаллов типа теллура состоит из трех зон. Максимум валентной зоны может быть расположен в одной из точек  $\Gamma$ ,  $A$ ,  $K$ ,  $H$  (в обозначениях<sup>10</sup>) зоны Бриллюэна. Независимо от того, в какой из указанных точек будет расположен максимум, касание зон в экстремальных точках не имеет места и, следовательно, в кристаллах типа теллура должен наблюдаться один тип дырок. Поверхностями постоянной энергии вблизи максимума будут эллипсоиды вращения вокруг главной оси кристалла. Для кристаллов типа висмута получено, что как в отсутствие, так и при учете спин-орбитального взаимодействия экстремумы функции  $E(\mathbf{k})$ , следующие из симметрии кристалла, расположены в центре зоны Бриллюэна и в центрах граней на поверхности зоны. Без учета спин-орбитального взаимодействия в некоторых точках зоны Бриллюэна возможно касание двух зон. Учет спин-орбитального взаимодействия приводит к снятию этого вырождения. Все зоны становятся простыми. При некоторых условиях, наложенных на константы взаимодействия вторых и третьих соседей, максимум валентной зоны будет расположен в центре зоны Бриллюэна. Поверхностями постоянной энергии вблизи максимума будут эллипсоиды вращения вокруг оси кристалла третьего порядка. Найдена симметрия волновых функций состояний валентной зоны.

В докладе Г. Е. Пикуса и Г. Л. Бира «Влияние деформации на энергетический спектр и электрические свойства дырочного германия и кремния» дан вывод выражения для спектра дырок в деформированном кристалле. Из общей формулы получены предельные выражения для энергии, одно из которых справедливо на достаточном удалении от края зоны, а другое, наоборот, справедливо у края зоны. Из этих формул следует, что в то время как при высоких температурах эффекты пьезосопротивления пропорциональны деформации и относительно малы при достаточно низких температурах, электрические свойства деформированного кристалла становятся резко анизотропными; степень анизотропии вообще не зависит от величины деформации, а определяется только ее направлением. А. И. Ансельм отметил большую ценность работы, изложенной в докладе. Изучение влияния деформации на электрические свойства полупроводников может дать важные сведения об их зонной структуре.

Много внимания на совещании было уделено теории примесных центров, их люминесценции и расчету рекомбинации различных центров в кристалле. В докладе И. А. Мирцхулава «Определение коэффициентов рекомбинации различных центров в кристалле» приводилось вычисление коэффициентов рекомбинации дефектов в кристалле с применением стохастического метода. Рассматривалось случайное блуждание частиц в кристаллической решетке, на которое накладывается некоторое упорядоченное движение, вызванное полем центра рекомбинации  $V(r)$ . Каждый центр рекомбинации окружался идеально поглощающей сферической поверхностью радиуса  $R$ , и искалась вероятность того, что после  $N$  перемещений частица первый раз окажется на заданной поглощающей сферической поверхности.

Для коэффициента рекомбинации получено следующее выражение:

$$\beta = 4\pi D \left( \frac{a}{1 - e^{-a/R}} + \frac{R^2}{\sqrt{\pi D t}} \right),$$

где  $D$ —коэффициент диффузии,  $a = \frac{e^2}{\epsilon k T}$  ( $\epsilon$ —диэлектрическая постоянная). При  $R \rightarrow 0$

$$\beta = 4\pi D a,$$

что совпадает с результатами С. И. Пекара<sup>11</sup>. Введенный радиус идеально поглощающей сферы имеет вполне определенный физический смысл. В случае рекомбинации электрона с дыркой  $R$  представляет собой радиус орбиты валентного электрона. В случае рекомбинации вакансий противоположных знаков или вакансий и междоузельного иона радиус  $R$  по порядку величины равен межатомному расстоянию (тогда в формуле для  $\beta$  вторым членом нельзя пренебречь; учет его дает для начальной стадии рекомбинации неравновесных центров зависимость  $\beta$  от времени). Для обобщения полученных результатов на случай подвижных центров рекомбинации достаточно заменить  $D$  на  $D_1 + D_2$ , где  $D_1$  и  $D_2$ —коэффициенты диффузии рекомбинирующих частиц.

В ходе дискуссии А. И. Губанов выразил сомнение в применимости приведенного расчета к рекомбинации электрона и дырки, ибо здесь главную роль играют квантовые эффекты. Как заметил В. Л. Бонч-Бруевич, для выяснения того, когда применима изложенная теория, а когда нужно учитывать квантовые эффекты, необходимо сравнить времена  $\tau_{\text{диф}}$  и  $\tau_{\text{рекомб}}$ .

С. И. Пекар указал, что коэффициент рекомбинации  $\beta$  по определению не должен явно зависеть от времени. Быть может, как указал сам докладчик, его результаты справедливы в предельном случае больших  $t$ , а поэтому следует устремить  $t$  к бесконечности. При этом второй член в  $\beta$  пропадет и результат совпадет с результатами, полученными в <sup>11</sup>.

В докладе А. М. Ратнера и Г. Е. Зильбермана «К теории люминесценции примесных центров» приводились результаты вычислений спектральной зависимости коэффициента поглощения и интенсивности испускаемого света для фосфоров, содержащих примесные центры свечения. При этом учитывались как смещения поглощений равновесия ионов решетки при электронном переходе, так и изменение частот колебаний решетки. Показано, что изменение частот колебания решетки при электронном переходе ответственно за отклонение спектров поглощения и люминесценции от зеркальной симметрии, так что пренебрежение изменением частот допустимо только в случае выполнения «закона зеркальной симметрии». Установлена связь между отклонением спектров поглощения и люминесценции от зеркальной симметрии и их отклонением от формы гауссовой кривой. Оба эти эффекта связаны с изменением частот при электронном переходе. Получено соотношение, непосредственно связывающее спектры поглощения и люминесценции, из которого, в частности, следует закон Стокса. Вычислена вероятность безызлучательного перехода между дискретными энергетическими уровнями кристалла, обусловленными наличием примесного центра. Показана связь между вероятностью температурного гашения люминесценции и формой спектра люминесценции. Исследована зависимость энергии активации безызлучательных (тепловых) переходов от асимметрии спектров поглощения и люминесценции. Произведено качественное сравнение теории с экспериментом. С помощью полученных результатов сделаны предположительные качественные выводы о механизме переноса энергии от решетки к атомам примеси в случае возбуждения кристалла жестким излучением или ультрафиолетовым светом в полосе собственного поглощения кристаллов.

Вопросы теории центров люминесценции в щелочно-галогидных кристаллофосфорах рассматривались в докладе И. Н. Кристофеля «Квантовомеханический расчет адиабатических потенциалов и спектров центра люминесценции в  $\text{KCl-Tl}$ ». Центры люминесценции в щелочно-галогидных кристаллофосфорах имеют малые эффективные радиусы. Моделью центра служит ион активатора, замещающий катион основания в узле решетки. Активатор взаимодействует с локальными колебаниями. Число ионов, входящих в центр, определяется числом ионов, участвующих в локальных колебаниях. Исходя из нерелятивистского гамильтониана всего кристалла, в адиабатическом приближении получены уравнения, определяющие одноэлектронные волновые функции ионов, входящих в центр. В качестве нулевого приближения принимались радиальные функции с учетом деформирующего влияния поля точечной решетки, определяемые методом <sup>12</sup>. «Неточечность» ионов рассматривалась как возмущение. Получены выражения для энергии активатора в решетке и для адиабатического потенциала. В щелочно-галогидных кристаллофосфорах активатор взаимодействует намного сильнее с полностью симметричным, чем с остальными локальными колебаниями. Поэтому в первом приближении можно пользоваться так называемым одноосцилляторным приближением. В качестве конкретного примера рассматривались  $^1S_0$ - и  $^3P_1$ -состояния центра люминесценции в  $\text{KCl-Tl}$ . Получено, что при внедрении  $\text{Tl}^+$  в основном состоянии в решетку  $\text{KCl}$  он несколько «раздвигает» окружающие ионы, а в возбужденном состоянии, наоборот, «подтягивает». Энергия замещения  $\text{K}^+$  в узле решетки  $\text{KCl}$  на  $\text{Tl}^+$  в основном состоянии  $\sim 0,43$  эв. Частота полностью симметричного локального колебания в обоих состояниях меньше предельной частоты оптических колебаний чистого  $\text{KCl}$ . Получены выражения для адиабатических потенциалов  $^1S_0$ - и  $^3P_1$ -состояний центра люминесценции в  $\text{KCl-Tl}$  и для спектров поглощения и излучения. Согласие теории с экспериментом хорошее.

В докладе Ю. Э. Перлина «Учет поляронного эффекта в теории многофононной ионизации примесных центров» рассматривалась проблема тепловой ионизации  $F$ -центра. Учитывался факт, что процесс ионизации с переходом в поляронное состояние более вероятен, чем образование свободного электрона. Для рассмотрения таких переходов осуществлялось преобразование к переменным теории поляронов Пекара адиабатического гамильтониана решетки, соответствующего локализованному состоянию электрона. Приближенная волновая функция преобразованного гамильтониана получена с помощью прямого вариационного метода. В качестве оператора многофононного безызлучательного перехода выбирался «потенциал Бете—Зоммерфельда»

$$V(\mathbf{r}) = -(\mathbf{u}(\mathbf{r}), \nabla \psi),$$

где  $\mathbf{u}$ —смещение континуума, порожденное продольными акустическими волнами. Получена формула для вероятности безызлучательной ионизации. Удалось установить соотношение между вероятностью термоионизации и среднеравновесным значением эффективного поперечника захвата на данный локальный уровень при многофононных переходах.

В докладе К. К. Ребане «Связь между рекомбинационным свечением и проводимостью в кристаллофосфорах» было показано, как в случае обычно используемых

зонных схем однородных кристаллофосфоров получить точную теоретическую связь между рекомбинационным свечением и проводимостью (концентрацией свободных носителей). Для получения этой связи достаточно рассматривать основное уравнение рекомбинации, т. е. уравнение, непосредственно описывающее рекомбинацию, при которой возникает свечение. Для ряда возможных видов основных уравнений рекомбинации получены конкретные формулы связи как в случае изотермических, так и в случае неизотермических процессов релаксации. В частности, рассмотрена зонная схема, где имеется чисто электронная (дырочная) проводимость, а свечение возникает при рекомбинации электронов на дырочных уровнях захвата лишь одного сорта. Формулы, выражающие связь между рекомбинационным свечением и проводимостью, полезны в трех отношениях: а) они могут служить критерием соответствия основного уравнения рекомбинации реальному процессу; б) если формулы связи при каких-то значениях входящих в них параметров удовлетворяются, то тем самым определены эти параметры для рассматриваемого объекта; в) они могут служить добавочными критериями точности теоретических кривых релаксации, вычисленных из любой системы кинетических уравнений, содержащих основное рекомбинационное уравнение рассматриваемых видов.

Доклад В. М. Буймистрова и В. Н. Пискового «Исследование точности вариационного метода в задаче о примесном поглощении в кристаллах кремния» был посвящен оценке точности вариационного метода строго математическим способом. В работах<sup>13</sup> дается метод оценки точности приближенных собственных значений линейного самосопряженного оператора, а также средних значений функций координат системы и интенсивностей переходов. В доложенной работе эти результаты применялись к оценке точности вычисленных прямым вариационным методом энергетических термов оптического электрона примесного атома 5 группы в кремнии и германии, когда гамильтониан оптического электрона записан в приближении метода эффективной массы. Показано, что, используя знание точных решений задачи в предельном «водородном» и предельном адиабатическом случаях, можно получить верхний предел погрешности приближенных значений энергетических термов, который не превышает нескольких процентов.

В докладе М. М. Зарипова, В. М. Винокурова и В. Г. Степанова «Парамагнитный резонанс в монокристаллах рутила» сообщались результаты исследований  $\text{TiO}_2$  с парамагнитной примесью ( $\text{Fe}^{3+}$ ). При комнатной температуре, при длине волны  $\sim 3,2$  см, наблюден спектр парамагнитного резонанса. Число наблюдаемых резонансных линий поглощения сильно зависит от направления постоянного магнитного поля по отношению к оптической оси кристалла. Анализ спектра показал, что спектр обязан ионам  $\text{Fe}^{3+}$ , изоморфно замещающим  $\text{Ti}^{4+}$  в решетке рутила. Для интерпретации спектра построен спиновый гамильтониан и найдены его параметры.

Кроме охарактеризованных выше докладов, включенных в программу совещания, по решению оргкомитета большое число докладов было представлено вне программы. Соответствующие аннотации в напечатанном виде были распространены среди участников совещания для обсуждения.

Во второй половине дня проходили семинары, созывавшиеся по инициативе отдельных групп.

В ряде представленных вне программы докладов рассматривались вопросы многоэлектронной теории полупроводников. Теория элементарных возбуждений в атомных полупроводниках с двумя валентными электронами на каждом атоме излагалась в докладе А. Г. Самойловича и С. Л. Королюка. В докладе С. В. Вонсовского и М. Ш. Гитермана рассматривалась многоэлектронная трактовка ионных кристаллов; общая теория применялась к исследованию электропроводности антиферромагнитных полярных кристаллов и к анализу зависимости параметров полупроводников от концентрации примесей. Расчет магнетосопротивления для полупроводников со спиновозамкнутым фоном на основе новой формы полярной модели кристалла произвел И. В. Стасюк. Для сильных магнитных полей получена практически линейная зависимость сопротивления от напряженности магнитного поля, а для слабых полей — квадратичная. Вычисление вклада экситонов Френкеля в магнитную восприимчивость полупроводников на основе той же теории было произведено В. В. Владимировым. Показана возможность существования при некоторых условиях большого парамагнетизма экситонов. А. Е. Глауберман и И. Т. Цымбарский произвели учет характера химической связи в теории магнетосопротивления для полупроводников типа германия. К. Б. Толпыго произвел теоретическое исследование свойств не вполне полярных кристаллов.

Структура энергетического спектра носителей тока исследовалась в нескольких докладах. А. И. Губанов и Ф. М. Гашидзе исследовали методом теории групп зонную структуру полупроводников типа  $\text{CdIn}_2\text{Se}_4$ . К. Я. Штивельман изучил на основе многоэлектронной теории энергетический спектр дырок в кристаллах со структурой алмаза; существенным является введение в рассмотрение спин-орбитального взаимодействия. Соприкосновение энергетических полос в кристаллах рассматривали О. В. Ковалев и Т. Я. Любарский; они исследовали вырождение,

связанное с пространственной симметрией и симметрией относительно изменения знака времени. Е. К. Кудinov при многоэлектронном подходе вычислил энергетический спектр дырок в  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  с учетом характера связей. Э. И. Рашба и В. И. Шеква провели теоретико-групповое исследование зонной структуры полупроводников.

В ряде докладов изучались оптические явления. Оптические свойства полупроводников в инфракрасной области рассмотрел В. И. Черепанов. Экситонное поглощение света в записи меди в отсутствии внешних стационарных полей исследовал С. А. Москаленко; водородоподобные серии узких полос поглощения, обнаруженные в записи меди на длинноволновом крае собственного поглощения, объясняются возникновением экситонных состояний Ванье—Мотта с квазимульсом, близким к нулю. А. А. Воробьев изучал связь добавочного поглощения и химического состава щелочно-галогидных кристаллов. И. В. Абаренков при помощи метода эффективного потенциала исследовал свойства  $F$ -центров: положение максимума  $F$ -полосы поглощения и его зависимость от всестороннего сжатия. Л. Э. Гуревич и И. П. Ипатовой был рассмотрен эффект Фарадея в полупроводниках на свободных носителях. Решена задача о собственных значениях и собственных функциях электрона проводимости с анизотропной массой при наличии сильного магнитного поля. Взаимодействие со светом рассмотрено квазистационарным методом без учета столкновений.

Некоторые доклады были посвящены исследованию фото- и термоэлектрических явлений в полупроводниках. В докладе И. Д. Потехиной, посвященном релаксационным процессам в фототриоде, рассчитана релаксация разности потенциалов между эмиттером и базой и релаксация коллекторного тока при включении и выключении освещения.

В докладе В. Е. Харциева рассматривалась кинетика фото- и термо-стимулированных явлений, заключающихся в изменении проводимости полупроводника с центрами прилипания в процессе его нагрева при различных типах подсветок. Е. Н. Агафонова и А. А. Якуб изучали влияние анизотропии энергетического спектра атомного полупроводника на термоэдс, обусловленную эффектом увлечения. Вычислена термоэдс в предположении, что поверхность постоянной энергии электронов может быть аппроксимирована эллипсоидом вращения. Результаты экспериментальных исследований изменения фотоэлектрических свойств слоев селенистого цинка в зависимости от их структуры были представлены в докладе Г. А. Жолкевича. Влияние термоэлектрических сил на скин-эффект в металле рассматривали М. И. Каганов и В. М. Цукерник.

Много внимания было уделено вопросам кинетики и неравновесным процессам в полупроводниках. А. Д. Чевычелов рассчитал вольтамперную характеристику  $p$ — $n$ -перехода, учитывая рекомбинацию электронов и дырок в переходном слое. А. Г. Самойлович и М. И. Клиггер применили общее выражение неравновесной функции распределения к важному случаю анизотропного слабого электронно-фононного рассеяния при анизотропных спектрах энергии электронов и фононов. Получено выражение тензора времени релаксации в анизотропном кристалле  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Б. Я. Юрков в расчете соотношение пробег—энергия для атомов кристаллической решетки кремния, выбиваемых при облучении кристалла электронами. Е. П. Покатилов изучил резонанс носителей тока под действием ультразвуковой волны, рассматривая взаимодействие находящихся в магнитном поле носителей тока с электрическим полем, созданным ультразвуковой волной. В. А. Коварский исследовал зависимость тепловых переходов электронов в полупроводниках от константы электронно-фононной связи. Вопрос о роли двухфононных процессов в рассеянии электронов проводимости в ионных кристаллах был рассмотрен в докладе И. Г. Ланг. Определено время релаксации электронов проводимости в ионных кристаллах, связанное с двухфононным рассеянием на оптических колебаниях решетки. Л. Э. Гуревич и Г. А. Романи произвели расчет теплопроводности ферромагнитных полупроводников при низких температурах, учитывая рассеяние фононов и магнонов на дефектах решетки и друг на друге. Б. Я. Мойжес рассчитал перенос тепла электромагнитным излучением в одноосных кристаллах. Развитая теория связана с экспериментальными результатами Е. Д. Деяtkовой и И. А. Смирнова. Электропроводность магнетита при низких температурах исследовали Н. П. Конторович и Ю. П. Ирхин. А. Г. Самойлович и В. М. Ницович рассмотрели влияние корреляции между электронами на электрические свойства полупроводников с узкой примесной зоной. Получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для германия. В. П. Шабанский изучал неравновесные процессы в примесных полупроводниках. На основе кинетических уравнений для примесных полупроводников получен явный вид кинетических коэффициентов. В. Г. Скобков вычислил проводимость полупроводников при низких температурах в сильном магнитном поле, обусловленную рассеянием электронов на нейтральных примесях и дефектах решетки. Басс Ф. Г. и М. И. Каганов построили теорию гальваномагнитных явлений на основе классического кинетического уравнения при условии  $\mu H \ll kT$ . И. М. Цидильковский и В. П. Широковский рассмотрели гальвано- и термомагнитные

явления в электронном и дырочном германии с учетом особенностей энергетического спектра носителей тока, на основе кинетического уравнения. В сообщении С. М. Рыбкина, Ю. Л. Иванова, А. А. Гринберга, С. Р. Новикова и Н. Д. Потехиной излагались результаты исследования распределения концентрации неосновных носителей в магнитном поле и, в частности, данные о продольном магнитокоцентрационном эффекте в продольном магнитном поле.

На семинаре по магнитным свойствам твердых тел были заслушаны доклады В. Л. Гуревича «Поглощение ультразвука в металлах в магнитном поле», А. М. Косевича и В. В. Андреева «Об интеграле столкновений в квантовом кинетическом уравнении», М. И. Каганова «О релаксации магнитного момента в ферромагнитных диэлектриках», К. Б. Власова и Б. Х. Ишмухаметова «К вращению плоскости поляризации упругих волн в магнитно-поляризованных магнеоупругих средах», Е. А. Турова «К теории слабого ферромагнетизма».

Семинар по теории  $p$ - $n$ -переходов в полупроводниках был посвящен обсуждению следующих вопросов:

1. Расчет статической вольтамперной характеристики  $p$ - $n$ -перехода для случая высоких уровней инжекции; основные принципы управления током через  $p$ - $n$ -переход путем изменения диффузионной длины (доклад В. И. Стафеева).

2. Об уточнении расчета статической вольтамперной характеристики  $p$ - $n$ -перехода при наличии рекомбинации в области объемного заряда (доклад В. И. Стафеева и Б. В. Царенкова).

3. Учет влияния объемного заряда подвижных носителей на электрический пробой резко асимметричного  $p$ - $n$ -перехода (доклад А. И. Уварова).

На семинаре по вопросам механизма люминесценции и электропроводности в ионных кристаллах выступили Ч. Б. Луцкий с докладом «О механизме люминесценции щелочно-галлоидных кристаллофосфоров» и П. В. Мейкляр и В. В. Гладковский с докладом «Темновая проводимость бромистого серебра и ее изменение после освещения».

На семинаре, посвященном квантовым функциям Грина в статистической физике, были заслушаны доклады: В. Л. Бонч-Бруевича и Ш. М. Когана «К теории температурных квантовых функций Грина» и Н. Н. Боголюбова и С. В. Тябликова «Запаздывающие и опережающие функции Грина в статистической физике».

Состоялись также семинары по вопросам взаимодействия различных видов излучения с полупроводниковыми материалами, по полупроводникам с носителями тока малой подвижности и по структуре зон в различных полупроводниках.

Совещание показало значительный рост исследований по теории полупроводников и существенное пополнение кадров теоретиков, работающих в этой области, главным образом за счет молодых специалистов. Большинство представленных на совещание работ выполнено на высоком уровне и имеют большой научный интерес.

А. Е. Глауберман, И. В. Стасюк.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. R. J. Elliot, Phys. Rev., 108, 1384 (1957); G. Dresselhaus, Phys. Rev. 106, 76 (1957).
2. Е. Ф. Гросс, УФН, 63, 575 (1957); Е. Ф. Гросс, Б. П., Захарченя, Н. М. Рейнов, ДАН СССР 99, 231 (1954).
3. С. В. Вонсовский, Е. А. Туров, ФММ 3, 385 (1956).
4. С. И. Пекар, ЖЭТФ, 33, 1022 (1957); С. И. Пекар, ЖЭТФ 34, 1176 (1958)
5. Zwerdling and Lax, Phys. Rev., 106, 31 (1957); Гросс и др., ЖТФ, 27, 2177 (1957).
6. R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap., 12, 6 (1957).
7. Е. А. Туров, В. Г. Шавров, Труды Ин-та физики металлов УФАИ, вып. 20 101 (1958).
8. K. G. McKay, Phys. Rev. 94, 877 (1954); S. L. Miller, Phys. Rev., 99, 1234 (1955).
9. А. Г. Самойлович и К. Д. Товстюк, ЖТФ 27, 1753 (1957).
10. R. J. Elliot, Phys. Rev., 96, 280 (1954).
11. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, (1951).
12. М. И. Петрашень, А. В. Иванова, Г. Вольф, Вестник ЛГУ, № 10 29, (1956).
13. T. Kato, Journ. Phys. Soc. Jap. 4, 334 (1949); G. Temple, Proc. Roy. Soc 211A, 204 (1952); В. М. Буймистров, ЖЭТФ 35, 1161 (1958).