

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУКСОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ

IV СОВЕЩАНИЕ ПО ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

С 17 по 22 октября 1960 г. в г. Тбилиси состоялось IV Всесоюзное совещание по теории полупроводников, созданное комиссией по полупроводникам АН СССР совместно с АН Груз. ССР и Тбилисским госуниверситетом им. Сталина. В совещании участвовало более 250 специалистов, представлявших 25 городов Советского Союза. На пленарных и секционных заседаниях, а также на тематических семинарах было прочтено более 80 докладов, вызвавших оживленную дискуссию.

Открывая совещание, председатель оргкомитета С. И. Пекар посвятил вступительное слово памяти скончавшегося академика Абрама Федоровича Иоффе — крупнейшего ученого и организатора советской физики, особенно много сделавшего для развития физики полупроводников в Советском Союзе. Академик АН Груз. ССР Э. Л. Андроникашвили охарактеризовал выдающуюся роль А. Ф. Иоффе в деле создания большого числа физических и физико-технических институтов во многих городах Советского Союза и воспитания громадной плеяды талантливых ученых, возглавляющих сейчас советскую физику. Он подчеркнул огромный научный кругозор и широту интересов Абрама Федоровича, его замечательную научную интуицию, позволявшую ему правильно намечать наиболее перспективные пути развития науки.

Перед обсуждением оригинальных работ был заслушан обзорный доклад К. Б. Толпыго, А. И. Губанова, Г. Г. Талуца, В. А. Мямлина о наиболее интересных зарубежных работах участников Пражской конференции по полупроводникам.

С 29. X III по 2. IX 1960 г. в Праге состоялась Международная конференция по физике полупроводников, в которой участвовало около 600 человек, представлявших 25 стран. На 21-м секционном заседании было заслушано около 200 докладов. Примерно 40 сообщений обсуждалось в пяти дискуссионных группах по репортерской системе. На двух пленарных заседаниях были заслушаны доклады А. Ф. Иоффе «Новые пути исследования полупроводников», В. Шокли «Проблемы, относящиеся к $p-n$ -переходам в кремнии» и заключительный доклад д-ра Я. Тауца (ЧССР), подводящий итоги конференции. В докладе Шокли обсуждались факторы, обуславливающие большие обратные токи в кремниевых $p-n$ -переходах: ударная ионизация, требующая энергии всего $1,1 \text{ эв}$ (закон сохранения импульса осуществляется благодаря участию фононов), наличие значительных неоднородностей в распределении примеси и участков SiO_2 , создающих местные повышения поля, образование в отдельных местах микроплазм и т. д. Теория находится в полуколичественном согласии с наблюдаемыми закономерностями.

Центральное место на конференции занимали проблемы энергетической структуры конкретных полупроводников: установление формы электронной и дырочной зон, эффективных масс носителей, во вторую очередь — спектра экситонов, примесных и поверхностных состояний электронов, а также состояний фононов. Для этого применялись методы циклотронного и парамагнитного резонансов, разнообразные оптические и магнитооптические измерения, исследования электролюминесценции и др. в комбинации с теоретическими работами. Теоретические работы группировались возле двух направлений: 1) обоснования одноэлектронного приближения и разработки методов расчета зонных структур и 2) построения теорий разнообразных явлений на основе зонных представлений с последующим определением параметров зон из сравнения с опытом.

В обзорном докладе В. Кона (США) были подытожены результаты работ по обоснованию представлений об электронах и дырках как квазичастицах с определенным законом дисперсии, взаимодействующих по закону Кулона с диэлектрической постоянной ϵ . Среди основных достижений были отмечены метод нелокального потенциала Пратта, введение потенциала отталкивания взамен условия ортогональности, адиабатическое рассмотрение движения зонного электрона, теория поляронов.

Ф. Херман (США) рассказал о схеме расчета зонных состояний электронов на быстродействующих счетных машинах (до $4 \cdot 10^6$ операций в секунду). В докладах Н. Пинчерле и П. Ли (Англия) и Дж. Делла Ричча (Франция) были приведены результаты расчета зон соответственно для схемы прямоугольных потенциальных ям в трехмерной решетке и для соединений Mg_2Sn , Mg_2Ge — с использованием атомных потенциалов. Ф. Квелл (США) рассказал о расчетах зонной структуры по методу OPW и APW с заменой условия ортогональности потенциалом отталкивания и с учетом взаимодействия электронов с помощью нелокального потенциала Пратта. Дж. Филлипс (Англия) исследовал распределение плотности заряда электрона в ковалентных и ионных кристаллах типа Si, Ge и BN вдоль направления (111) для состояний валентной зоны и зоны проводимости в зависимости от волнового вектора k . Ряд теоретических и экспериментальных работ был посвящен исследованию поглощения полупроводников вблизи края собственной полосы. Ф. Штерн (США) рассчитал интенсивность прямых оптических переходов в InAs и InSb с помощью теории Кейна и из сравнения теории с опытом оценил эффективную массу электрона в InAs в $0,024 m$ и массу тяжелых дырок в InSb в $0,4 m$. Р. Эллиот (Англия) предложил теорию непрямых переходов в случае простой зонной схемы. Ее согласие с опытами в Cu_2O было продемонстрировано С. Никитиным (Франция). Это дало возможность установить характер переходов в области «ступенек» на кривой поглощения и линий желтой экситонной серии. А. Хауг (ФРГ) предложил теорию экситонов на основе метода ГЛГ, охватывающую модели Френкеля, Ванье и Хеллера — Маркуса (однако без обоснования диэлектрической постоянной для взаимодействия электрона с дыркой). В. Чойки и Л. Патрик (США) исследовали тонкую структуру края поглощения в SiC (тип 6H) и установили наличие экситонов в этом кристалле, причем оптические переходы сопровождаются излучением или поглощением различных фононов. Дж. Диксон (США), исследуя поглощение InAs в более широкой области спектра и при значительных концентрациях примеси, установил отклонение зависимости энергии от волнового вектора $E(k)$ от параболической.

В нескольких работах исследовалось инфракрасное поглощение свободными носителями, по величине которого оценивалась эффективная масса: Дж. Диксон — в InAs, Л. Хульдт (Швеция) — в Si. В последней работе остроумно использованы фотонистели, создаваемые модулированным светом, что позволяет однозначно выделить обусловленное ими поглощение. В работе М. Кардона (Швейцария) эффективная масса в InSb, InP, GaSb, GaAs оценивалась по зависимости поляризуемости кристалла от концентрации свободных носителей. В работе Дж. Хайнса, М. Лэкса и В. Флуда (США) была исследована и расшифрована тонкая структура спектра рекомбинационного излучения в кремнии при прохождении тока через p — n -переход. Различные пики на кривой интерпретировались как соответствующие комбинациям межзонных и экситонных переходов с участием различных фононов, а также уровней примесей.

Значительное число работ было посвящено магнитооптическим свойствам полупроводников: циклотронному резонансу в инфракрасной области — Е. Паллик, Г. Пайкус, С. Тейтлер, Р. Вэллис (США) — на InSb; эффекту Фарадея — Е. Мосс и Велтон (Англия) — на InSe и InP; эллиптичности, связанной с эффектом Фарадея, — С. Смит и У. Пиджон (Англия) — в InSb; эффекту Зеемана для экситонного поглощения и др. Особенно интересный обзорный доклад сделал Б. Лэкс. Кроме только что перечисленных явлений, он остановился на магнетоплазменном эффекте и магнитотуннельном эффекте (зависимости тока Зинера от магнитного поля). Следует отметить экспериментальное обнаружение дырок с отрицательной эффективной массой в Ge с помощью циклотронного резонанса Г. Дусманисом и др. (США) и теорию циклотронного резонанса для таких дырок, созданную Б. Розенблюмом и Р. Дунканом (США).

Обзор своих работ по парамагнитному резонансу доноров в Ge, Si и InSb сделал Г. Фейер (США). Он остановился на вопросах расщепления линии поглощения вследствие взаимодействия спина электрона со спинами ядер, вырождения донорных уровней вследствие наличия нескольких минимумов энергии, изменения спектра парамагнитного поглощения при деформации кристалла и, в частности, изменения g -фактора Δg_{\parallel} и Δg_{\perp} спин-решетчатой релаксации. Парамагнитный резонанс на электронах проводимости и, в частности, спин-решетчатая релаксация исследовались Г. Ланкастером и Е. Шнейдером (Англия). В широкой температурной области $T/T_s \sim 0,25$ (Δg)² (T_s — время релаксации, T_r — время свободного пробега электрона), в согласии с теорией Эллиота. Теория спин-решетчатой релаксации была предложена Л. Уроу и Рот (США) на основе обобщения метода потенциала деформации.

Среди многих работ по исследованию дефектов в ионных кристаллах наиболее интересна работа В. Кенцига (США), доказавшего, что парамагнитный резонанс в щелочно-галогидных кристаллах с избытком дырок обязан автолокализации дырок на двух ближайших галогидных ионах в идеальном кристалле. Такая система обладает

ничтожным коэффициентом диффузии из-за большой эффективной массы, связанной с деформацией кристалла. Х. Рабин и Я. Шулман (США) установили тонкую структуру (наличие трех пиков) F -полосы в CsCl и CsBr . А. Гальперин и др. (Израиль) исследовали скорость исчезновения различных центров окраски в щелочно-галондных кристаллах при постепенном их нагреве и, в частности, показали, что так называемая K -полоса не связана с возбужденными состояниями F -центра.

Другим важным направлением в работе конференции были проблемы явлений переноса, которым было посвящено четыре заседания. В обзорном докладе К. Херринг (США) отметил три возможных подхода к явлениям переноса: метод матрицы плотности, метод кинетического уравнения и метод скачков (для кристаллов с малой подвижностью), отметил факт аннуляции двухфонового рассеяния при последовательном проведении метода возмущений, упущенный предыдущими исследователями; остановился на методах ортогональных деформированных функций, неудовлетворительном состоянии теории примесного рассеяния и ряде других трудностей теории. Х. Эрнрейх (США) предложил теорию подвижности в GaAs n -типа, охватывающую явление Холла и зависимость подвижности от давления. Теория учитывает решетчатое и примесное рассеяния, используя данные о зонной структуре, и не содержит свободных параметров. Кроме теории рассеяния, работы этого направления касаются проблемы горячих электронов, гальваномагнитных явлений и других вопросов.

В повестке дня конференции были также вопросы поверхностных состояний, рекомбинации, фотопроводимости, радиационных дефектов, свойств полупроводниковых соединений, туннельных диодов и т. д.

1. ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Наибольшее количество представленных работ было посвящено исследованию оптических свойств полупроводников: теории экситонного поглощения, пространственной дисперсии, добавочных световых волн, рассеяния экситонов и др.

С. И. Пекар, М. С. Бродин, Б. Е. Цеквава «Оптическая анизотропия кубических кристаллов, добавочные световые волны в кристаллах и их экспериментальное обнаружение». Развита последовательная теория распространения световых волн в кубических кристаллах с пространственной дисперсией, учитывающая их анизотропию и возникновение добавочных волн¹. Получена частотная зависимость показателей преломления для волн, распространяющихся вдоль осей симметрии; она оказалась качественно различной для экситонных зон различной симметрии. Определена поляризация поглощения в зависимости от симметрии экситонного состояния. Сопоставление с данными Е. Ф. Гросса и А. А. Каплянско² по поляризации линии $n=1$ желтой серии в Cu_2O позволяет приписать ей симметрию Γ_{25} . Вблизи этой линии поглощения теория предсказывает существование либо отсутствие добавочных волн и связанных с ними осцилляций коэффициента прохождения с толщиной кристалла в зависимости от направления распространения и поляризации; этот вывод согласуется с данными И. С. Горбана и В. Б. Тимофеева³. Ранее осцилляции, имеющие такую же природу, были обнаружены в антрацене⁴.

По мнению выступившего в дискуссии В. М. Аграновича: 1) В теории С. И. Пекара среднее микрополе необоснованно заменяется макрополем электромагнитной волны. 2) Вывод о возможности возникновения дополнительных волн сделан на основе теории, справедливой в отсутствие поглощения, а сопоставление с экспериментом производится в области значительного поглощения. 3) Опыты М. С. Бродина не доказывают существования дополнительных световых волн, так как при наличии пространственной дисперсии векторы индукции основных волн не перпендикулярны друг к другу и между ними возможна интерференция. На это Пекар возразил, что: 1) Отличие макрополя от среднего микрополя значительно, только когда длина волны становится порядка постоянной решетки, и несущественно для рассматриваемых эффектов. 2) Все выводы теории сделаны на основе формул, учитывающих поглощение. 3) В опытах Бродина направление распространения света и его поляризация были выбраны так, что моноклинная ось антрацена остается главной осью поляризации и при учете пространственной дисперсии.

Р. Ф. Казаринов, О. В. Константинов «Допплеровское смещение линий экситонного поглощения». Развита теория экситонов большого радиуса для полупроводников, в которых минимальная энергия для прямых переходов из валентной зоны в зону проводимости достигается в точках K -пространства, в которых

$v = \frac{\partial E}{\partial k} \neq 0$. В этом случае у края межзонного поглощения возникает система экситонных полос. Их частоты обычным образом выражаются через кривизны электронной и дырочной зон, а наличие ненулевого наклона зон проявляется в возникновении доплеровского смещения $\Delta\omega = Kv$, где K — квазимпульс фотона. За счет конечности K этот член приводит к угловой зависимости частот, отличной для экситонов, формирующихся вблизи различных точек максимального сближения зон.

Е. Ф. Гросс, Б. П. Захарченя, О. В. Константинов «Эффект инверсии магнитного поля в спектре экситонного поглощения кристалла CdS». Наблюдалось смещение линий спектра поглощения CdS и изменение их интенсивности при инверсии магнитного поля \mathbf{H} . Из принципа Онгагера следует, что это возможно лишь при наличии пространственной дисперсии и отсутствии центра инверсии. В кристаллах типа CdS экситоны могут нести дипольный момент \mathbf{d} , ориентированный вдоль гексагональной оси; его взаимодействие с электрическим полем $\mathbf{E} = \frac{1}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}]$, возникающим в системе центра тяжести экситона, движущегося со скоростью \mathbf{v} , приводит к слагаемому в энергии $-\frac{1}{c} (\mathbf{d}[\mathbf{v}, \mathbf{H}])$. Эффект отсутствует для примесного поглощения и может служить для разделения экситонного и примесного поглощения.

На вопрос Э. И. Рашба о сопоставлении настоящей работы и работы Д. Томаса и Дж. Хопфилда⁵ Константинов ответил, что имеются отличия в спектрах, экспериментально наблюдавшихся в обеих работах, и соответствующие различия в их интерпретации. Отвечая на вопрос И. Б. Левинсона о том, почему эффект удастся наблюдать только на члене серии с $n = 2$, Константинов высказал предположение, что для этой линии достигается оптимальное соотношение между рядом факторов, определяющих эффект.

А. А. Демиденко «Микротория экситона Френкеля без учета и с учетом запаздывания в кубических кристаллах». В приближении Г.ПГ определена форма экситонных зон $E(\mathbf{k})$ кубического кристалла без учета дальнотдействующих кулоновских сил. Принято во внимание как дипольное взаимодействие, так и члены перекрытия Ψ -функций соседних молекул. Получены формулы $E(\mathbf{k})$ для малых произвольно ориентированных \mathbf{k} и для больших \mathbf{k} по направлениям C_4 , C_3 , C_2 . Получается одна продольная и две поперечные экситонные зоны. $E(\mathbf{k})$ в точке $\mathbf{k} = 0$ неаналитическая функция k_x , k_y , k_z . Проведена диагонализация гамильтониана кристалл+электромагнитное поле. Найдена диэлектрическая постоянная $\epsilon(\omega, \mathbf{k})$ и зависимость $\omega(\mathbf{k})$ для светоекситона. Частота одной из светоекситонных ветвей при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ совпадает с частотой продольной ветви; частота другой ветви с ростом \mathbf{k} приближается к зависимости для механического экситона.

В. С. Машкевич «Электромагнитные волны в среде, обладающей непрерывным энергетическим спектром (учет пространственной дисперсии)». Выведено интегральное соотношение между напряженностью поля E и поляризацией кристалла $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \int K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$. Получены соотношения между эрмитовой и антиэрмитовой частями ядра $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, являющиеся обобщением формул Кронига—Крамерса. С помощью явного выражения для ядра K в случае экситонов при $T = 0$ рассмотрено явление прохождения электромагнитной волны через пластинку и получен коэффициент нормального отражения с учетом дополнительных волн. Результаты отличаются от результатов Пекара, так как теория не накладывает условия равенства нулю поляризации у границы.

В дискуссии И. М. Лифшиц и М. И. Каганов подвергли сомнению возможность обойтись без граничного условия для поляризации \mathbf{P} . Такое граничное условие, по-видимому, неявно содержится в выводе формулы для ядра $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Пекар подчеркнул, что собственные функции возбужденного кристалла (экситона), на которых вычисляется \mathbf{P} , должны удовлетворять граничным условиям. Эти условия эквивалентны $\Gamma_{\text{границ}} = 0$.

В. Л. Стрижевский «Исследование некоторых особенностей дисперсии и экситонного поглощения света в кристаллах». Рассмотрена дисперсия и поглощение света кристаллом, когда разрешены переходы в состоянии дискретного или непрерывного спектра. В первом случае нельзя пользоваться теорией возмущений Дирака, и существенную роль играет пространственная дисперсия. Во втором случае последней можно пренебречь. По методу ван Хове рассмотрены диссипативные процессы и найдена комплексная поляризуемость кристалла при отличной от нуля температуре.

В дискуссии В. М. Агранович выразил сомнение в применимости развитой теории к случаю больших сил осциллятора, когда учет запаздывания существенно искажает ход $E(\mathbf{k})$ для экситона. В. И. Перель подверг критике утверждение докладчика о невыполнении соотношений Кронига—Крамерса даже без учета пространственной дисперсии.

В. Т. Черепанов и В. С. Галишев «Анизотропия квадрупольного экситонного поглощения света в кубических кристаллах». Методами теории групп исследованы правила отбора для оптических переходов в экситонные состояния кристалла с симметрией O_h без использования конкретной модели экситона. Квадрупольные переходы возможны в состоянии с симметрией Γ'_{25} и Γ_{12} . Экспериментальная зависимость интенсивности поглощения в Cu_2O от поляризации соответствует состоянию Γ'_{25} . Предсказан характер расщепления линий при сжатии кристалла по разным направлениям.

В дискуссии А. Г. Жилч указал, что теория не рассматривает магнитодипольных переходов в состоянии Γ'_{15} , обладающих такой же интенсивностью, как квадру-

полные. Он упомянул о своих расчетах зон в Cu_2O , согласно которым экситон образуется из состояний электрона и дырки, лежащих вблизи экстремумов зон Γ_1 и соответственно Γ'_{25} .

Е. Ф. Гросс, А. Г. Жилич, Б. П. Захарченя, А. А. Каплянский «Влияние магнитного поля и деформации кристалла на основное экситонное состояние Cu_2O ». Теоретически и экспериментально исследовано поведение линии $n=1$ желтой экситонной серии в Cu_2O в магнитном поле и при одноосном сжатии; при этом соответствующему экситонному уровню приписывается симметрия Γ'_2 . Для различных случаев определены расщепление и поляризация компонент. Теория находится в хорошем согласии с экспериментом.

В дискуссии С. А. Москаленко отметил, что частично аналогичные теоретические выводы о влиянии давлений были доложены им на XIII Совещании по спектроскопии.

С. А. Москаленко «Об энергетическом спектре экситонов в недеформируемых ионных кристаллах». Обсуждаются возможные состояния экситонов Мотта Ванье, образованных из состояний электронных и дырочных зон соединений типа Cu_2O и NaCl . Опыты Гросса и Каплянского легко объясняются из предположения, что верхняя валентная зона образована из состояний $3d$ оболочки Cu^+ . Рассмотрено расщепление линий экситона в присутствии внешних полей или деформации. Дается интерпретация пиков на кривой собственного поглощения щелочно-галогидных кристаллов. Обсуждается возможность образования биэкситонов, а также свойства вырожденного слабо неидеального экситонного газа. Высказывается мысль о возможности сверхтекучести экситонного газа.

В. М. Агранович «К теории экситонов в молекулярных кристаллах». Предложена теория смешивания экситонных состояний в молекулярных кристаллах под действием межмолекулярного взаимодействия, отличающаяся от теории Крейга тем, что учет вклада от нескольких ближайших состояний производится точно. Рассмотрен также вклад от состояний с возбуждением двух молекул. При актуальных значениях параметров учтенные члены изменяют поляризационное отношение на фактор порядка 1,5.

И. Г. Заславская «Расчет энергии возбужденных состояний экситона при промежуточной связи». Состояние $2p$ экситона Мотта рассматривалось методом Буймистрова и Пекара⁶ с использованием вариационного принципа. Уровни энергии оказываются ниже в сравнении с другими методами и существенно отклоняются от значения, вычисляемого по водородоподобной формуле.

С. В. Вонсовский, П. С. Зырянов, А. Н. Петров, Г. Г. Талуж «Влияние электрического и магнитного поля на форму линий экситонного поглощения». Проведено обобщение теории Тоедзавы формы полос экситонного поглощения на случай наличия электрического поля; определена зависимость положения и формы полос от поля. Найден вид полос поглощения экситонов большого радиуса в сильном магнитном поле с учетом квантования электронных орбит при слабой экситон-фононной связи.

Л. Э. Гуревич, И. П. Ипатова «К теории длинноволнового поглощения света кристаллами». Исследован механизм инфракрасного поглощения путем возбуждения световым квантом электронно-дырочной пары, аннигилирующей с образованием одного или двух фононов. Более интенсивным оказывается двухфононный механизм, причем интенсивность его резко возрастает, если наклонены двум участвующих в процессе фононных ветвей равны по величине и обратны по знаку.

В. М. Агранович и В. Л. Гинзбург «О рассеянии рентгеновских лучей в кристаллах с образованием экситонов». Рассмотрено комбинационное рассеяние рентгеновских лучей, при котором образуются экситоны. Эффективное сечение рассеяния оказывается только на порядок меньше сечения рассеяния на свободных электронах. Поэтому можно думать, что исследование зависимости изменения длины волны рентгеновских лучей от угла рассеяния позволит определить закон дисперсии $E(k)$ для экситонов.

Л. Н. Овандер «Комбинационное рассеяние в кристаллах». Комбинационное рассеяние рассматривается как распад одного светозекситона на два (стоксовское) и как превращение двух светозекситонов в один (антистоксовское). Выведена формула для интенсивности рассеяния в зависимости от частоты падающего света и направления волнового вектора рассеянного светозекситона. В случае малости взаимодействия формула переходит в полученную по теории возмущений.

В дискуссии, отвечая на вопросы В. М. Аграновича и Л. Н. Демиденко. А. А. Овандер добавил, что теория не приводит к расходимости в точке резонанса вследствие учета взаимодействия с палучением.

Э. И. Адирович «Экситон как волна фазового превращения». Высказывается предположение, что в веществах, обладающих полиморфизмом, экситон, локализовавшийся у границы раздела фаз, вследствие изменения динамических условий может снять аквационный барьер. При этом произойдет перестройка решетки и смещение границы раздела фаз, которое в свою очередь вызовет смещение экситона. Отмечается

возможность экситонного механизма полимеризации. Развивается формализм, обосновывающий возможность указанного процесса.

В дискуссии И. Л и ф ш и ц сказал, что идея работы интересна, но математическая формулировка неубедительна и в ее настоящем виде излишня. Он высказал предположение, что экситон может вызвать волну фазового превращения и не снимая активационного барьера, сообщить необходимый первый импульс, за которым уже будет распространяться волна, аналогичная волне двойникования. Напротив, по мнению Э. И. Адировича, применительно к полимеризации этот процесс является маловероятным, так как, согласно химическим данным, выделяющаяся энергия практически мгновенно уходит с реактивной степени свободы, и распространение процесса за счет кинетической энергии невозможно.

З. С. К а ч л и ш в и л и «Упругое рассеяние нелокализованного экситона на примесных центрах». В борновском приближении найдено сечение рассеяния экситона на междоузельных ионах или вакансиях. Поле дефекта складывается из кулоновского

$\pm \frac{e}{\epsilon r}$ и короткодействующего, различного для разных ионов. Для медленных экситонов главную роль играет кулоновское поле. Оценены температуры, ниже которых примесное рассеяние доминирует над решетчатым. В дискуссии В. Л. Б о н ч-Б р у е в и ч отметил, что для медленных экситонов борновское приближение неприменимо. При близких значениях эффективных масс электрона и дырки рассеяние в первом порядке исчезает и необходимо рассматривать следующее приближение.

А. С. С е л и в а н е н к о «Вычисление сечения рассеяния свободных экситонов на дефектах решетки молекулярного кристалла». Сечение рассеяния экситонов Френкеля на чужеродной молекуле вычислено в приближении ГЛГ с помощью функций Грина. При концентрации дефектов $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$ длина пробега оказывается сравнимой с длиной пробега решетчатого рассеяния при комнатной температуре.

Работа вызвала много критических замечаний. В частности, было обращено внимание на незаконность пренебрежения различием энергии возбуждения обычной и чужеродной молекул.

А. А. В о р о б ь е в «Собственное и дополнительное поглощение в ионных кристаллах и энергия решетки». Изложен ряд экспериментальных закономерностей положения полос собственного и примесного поглощения в ионных кристаллах в зависимости от энергии решетки. С уменьшением энергии связи полосы сдвигаются в красную сторону.

2. ЗОННАЯ СТРУКТУРА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Работы этого направления были посвящены теоретико-групповому анализу зонной структуры, количественным расчетам зон в конкретных веществах, рассмотрению жидких полупроводников, дислокационных зон и т. д.

О. В. К о в а л е в «О вырождении энергетических уровней электрона в кристалле». Методом нагруженных представлений⁷ построены матрицы однозначных и двузначных неприводимых представлений для всех точек симметрии зон Бриллюэна для каждой из 230 пространственных групп.

При обсуждении ряд лиц высказал сожаление, что публикация этого ценного справочного материала не организована. Левинсон отметил, что им также построены представления пространственных групп с использованием техники⁷.

Т. И. К у ч е р «Дырочные зоны в хлоридах щелочных металлов». Дан обзор результатов расчетов дырочных зон для хлоридов Li, Na, K и Rb с использованием хартриевских функций иона Cl^- . Актуальные максимумы валентной зоны лежат в 12 направлениях $[110]$ внутри бриллюэновской зоны; поверхности постоянной энергии вблизи них — трехосные эллипсоиды. Результаты для ширины дырочных зон и положений их краев сопоставляются с опытом и с расчетами Хоуланда.

В дискуссии К. Б. Т о л ы г о подчеркнул, что многоэлектронное рассмотрение дырочной зоны качественно не вносит ничего нового по сравнению с одноэлектронным приближением. Количественные отличия связаны: 1) с деформацией ψ -функции иона, на котором находится дырка, 2) с деформацией окружения и 3) с изменением интеграла наложения благодаря адиабатическому следованию состояний нормальных ионов при перемещении дырки. Н. Н. К р и с т о ф ь е л ь и П. Н. Н и к и ф о р о в отметили существенное изменение ψ -функций атомов при их объединении в кристалл, что должно повлиять на количественные результаты.

Ф. М. Г а ш и м з а д е, В. Г. Х а р п и е в «Исследование энергетической структуры некоторых полупроводников». Проведены расчеты энергий электронов валентной зоны и зоны проводимости в Si, Ge и GaAs для $k=0$ и $k=\frac{\pi}{a}$, 0, 0 по методу ОПВ с заменой условий ортогональности эффективным потенциалом отталкивания

по Антончику. ψ -функции остовов аппроксимированы функциями Слейтера. Результаты для Si и Ge сравнительно мало отличаются от результатов других авторов. Делается вывод, что для общей картины зон симметрия кристалла оказывается более существенным фактором, чем точный ход потенциала.

Е. И. Челюков, В. А. Чалдышев «Симметрия решений уравнений Хартри — Фока для кристаллов». Проводится обсуждение свойств симметрии функций Хартри — Фока для кристалла и сопоставление со свойствами блоховских функций; высказывается мысль, что соотношение $E(\mathbf{k})=E(-\mathbf{k})$ для дырочных зон может нарушаться.

По мнению Раинаба, выступившего в обсуждении, не следует ожидать нарушения этого соотношения, так как оно не связано с использованием блоховских волн и непосредственно следует из симметрии по отношению к инверсии времени, которой обладают и точные многоэлектронные функции.

А. Е. Глауберман, А. М. Муzychuk, М. А. Рувинский, И. В. Стасюк «Вопросы многоэлектронной теории твердых и жидких полупроводников». Обобщена развитая ранее форма полярной модели кристалла со спиновнезамкнутым фоном в направлении учета спиновых возбуждений (квазимагнонов), что дает существенные преимущества при описании зонных электронов и дырок; вычислена магнитная восприимчивость. На многоэлектронную теорию перенесена техника⁸ рассмотрения поглощения света в атомных кристаллах; рассмотрен процесс образования фотоном виртуальной пары электрон — дырка, аннигилирующей с образованием экситонов. Развита многоэлектронная теория примесных зон, которая приводит к большей ширине зон, чем простой учет прямого взаимодействия примесных центров. Развивается многоэлектронная теория жидкости; гамильтониан представления вторичного квантования после усреднения по классической функции Гиббса зависит от статистических корреляционных функций. Характеристики спектра системы (эффективные массы, размытие «краев» зон и т. д.) зависят от бинарной функции распределения и через нее — от температуры.

В дискуссии Пекар критически высказался по поводу проведения искусственной процедуры усреднения, не следующей логически из самого формализма теории. Отвечая на возражения, А. Е. Глауберман подчеркнул сложность рассматриваемой задачи и этим аргументировал необходимость указанного приближения; в более простой задаче оптики газов им ранее была проведена последовательная программа. Агранович отметил, что им было проведено аналогичное рассмотрение для молекулярной жидкости.

А. И. Губанов «О различных теориях аморфных полупроводников». Согласно более ранним работам автора для модели бесконечной жидкости со слабым нарушением ближнего порядка энергетический спектр сохраняет зонную структуру с резкими краями зон. Напротив, численные расчеты других авторов показывают расплывание краев зон с ростом беспорядка. Сопоставление, проведенное в настоящей работе, привело автора к выводу, что расплывание краев связано с конечностью числа атомов G , принимаемой в численных расчетах, и должно исчезнуть при $G \rightarrow \infty$.

Л. Д. Дудкин «Вопросы химической связи полупроводниковых соединений переходных металлов». Появление полупроводниковых свойств связывается с величиной параметра $\Delta = \frac{a - d_m}{a}$, где a — расстояние между атомами металла, а d_m — их

диаметр. При $\Delta > 0,145$ и насыщенности связей металл — металлоид должны проявляться полупроводниковые свойства. Предложены схемы связей между атомами в различных соединениях переходных металлов с Si, As и S и объяснен характер их проводимости.

А. Д. Чевычелов «Энергетический спектр электрона для модели полимерной цепочки». На основе упрощенной модели для электрона в полимерной цепи, состоящей из звеньев, повернутых друг относительно друга на случайные углы, получен косинусоидальный закон дисперсии с коэффициентами, зависящими от конфигурации цепи.

В дискуссии Э. Л. Нагаев и Э. И. Рашба отметили, что принятое приближение является весьма грубым, а надежные критерии его применимости отсутствуют.

3. ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Работы этого цикла были посвящены разнообразным проблемам: методу деформационного потенциала, рассмотрению гальвано-, термо- и фотомагнитных явлений в слабом и сильном магнитном поле и теории горячих электронов.

Г. Е. Пикус, Г. Л. Бир, Э. С. Нормантас «Теория деформационного потенциала и рассеяние носителей тока в полупроводниках с вырожденной зоной». Теория потенциала деформации обобщена для полупроводников с вырожденной зоной. Найдено уравнение для изменения энергии в зоне $E(\mathbf{k})$ при однородной деформации

кристалла $\text{Det} [\hat{S}(\mathbf{k}) + \hat{D}(\epsilon) - E] = 0$, где \hat{S} — матрица Шокли, $D_{\alpha\beta}^{ij} = \sum_{\alpha\beta} D_{\alpha\beta}^{ij} \epsilon_{\alpha\beta}$, $\epsilon_{\alpha\beta}$ — ком-

поненты тензора деформации. Для Si и Ge матрица \hat{D} характеризуется тремя постоянными. Задачу рассеяния электронов на акустических фононах можно сформулировать с помощью уравнений с эффективными массами для сглаженных функций $F_{j||} S(\mathbf{k}) +$

$+ D^{-1} \| F = i\hbar \frac{\partial F}{\partial t}$. Матрица D^A совпадает с $\hat{D}(\epsilon)$. Для оптических фононов D^A заме-

няется на D^0 , содержащее одну константу, характеризующую эффект относительного смещения двух подрешеток. Найденные вероятности рассеяния внутри зоны и между зонами оказываются сложными функциями \mathbf{k} и \mathbf{k}' . В пренебрежении анизотропией найдены вероятности рассеяния на акустических фононах. Решено кинетическое уравнение с учетом межзонных переходов.

Отвечая на вопрос В. А. Ч у е н к о в а, Г. Л. Б и р отметил, что данное рассмотрение является более общим по сравнению с рассмотрением Оверхаузера и Эренрайха, которые сделали приближение, эквивалентное приближению с одной константой в деформационном потенциале.

Е. И. П о к а т и л о в «Взаимодействие свободных электронов с ультразвуком в кремнии и германии». При $\omega\tau > 1$ вычислено электроакустическое поле с учетом анизотропии эффективных масс, потенциалов деформации и упругих постоянных, а также рассеяния на продольных и поперечных акустических фононах. Найдены угловые диаграммы электроакустического эффекта в Si и Ge. При $\omega\tau \ll 1$ поле найдено в предположении, что длина волны значительно больше размеров образца; в этом случае эффект почти изотропен, не зависит от масс и может служить для измерения деформационных потенциалов. Угловые диаграммы очень чувствительны к расположению экстремумов и анизотропии тензора масс и деформационного потенциала.

В. Л. Г у р е в и ч, Ю. А. Ф и р с о в «Теория электропроводимости полупроводников в магнитном поле при неупругом рассеянии». Исследована поперечная проводимость невырожденного электронного газа в сильном магнитном поле H при рассеянии на акустических и оптических фононах как в классической $\hbar\Omega \ll 2kT$, так и в квантовой $\hbar\Omega \gg 2kT$ областях (Ω — ларморовская частота). Результаты сопоставляются с полученными из кинетического уравнения и из теории⁹. В классической области при $\hbar\omega_0 \gg kT$ (ω_0 — частота оптических фононов) $\sigma(H)$ имеет многоступенчатый характер. При $\omega_0 > \Omega$ проводимость осциллирует, проходя через максимум при ω_0 кратном Ω . В проводимости участвуют как тепловые электроны с энергией $\sim kT$, так и рассеянные с помощью оптического фонона, несмотря на их малое число, так как эти электроны обладают пропорционально меньшим временем свободного пробега

(проводимость изменяется как $\frac{1}{\tau\Omega^2}$). Существует область магнитных полей, где $\tau\Omega \gg 1$

для тепловых электронов и в то же время $\ll 1$ для быстрых. В квантовой области при $\omega_0 \gg \Omega$ вдали от осцилляционных пиков проводимость изменяется как $1/H^2$.

И. Л и ф ш и ц подчеркнул принципиальную новизну выводов об осциллирующей проводимости для невырожденного газа.

А. И. А н с е л ь м, В. М. А с к е р о в «Термомагнитные явления в полуметаллах в сильном магнитном поле». В предположении квадратичного закона дисперсии при $\Omega\tau \gg 1$ и произвольного соотношения между $\hbar\Omega$ и kT вычислен продольный j_x и поперечный j_y ток в зависимости от градиента температуры $\nabla_x T (H = H_z)$. Учитывается, что функция распределения при $T = T(x)$ различна для разных положений центров орбит Ландау x_0 . В результате рассеяния происходит изменение x_0 , т. е. сдвиг электронов вдоль направления $\perp T$. В квантовом случае $\hbar\Omega \gg kT$ коэффициент Нернста пропорционален T^4/H и $T^{7/2}/H^2$, соответственно для вырожденного и невырожденного электронного газа.

В дискуссии Г. М. Недлин, О. В. К о н с т а н т и н о в и др. подвергли сомнению возможность использовать нулевое приближение по рассеянию при расчете холловского тока j_H .

Л. Э. Г у р е в и ч, Г. М. Н е д л и н «Вклад в теплопроводность электронов в результате увлечения фононов». С помощью техники Константинова и Переля получена система кинетических уравнений для электронов и фононов в квантовой области $\hbar\Omega \gg kT$ и доказан принцип Онзагера. Развита теория термо-эдс в квантующем магнитном поле. Рассмотрен херринговский случай, когда электроны увлекают длинноволновые фононы, а последние тормозятся на коротковолновых, и антихерринговский — когда длинноволновые фононы увлекают коротковолновые и торможение фононов происходит на дефектах и границах кристалла.

И. Я. К о р е н б л и т «Гальваномагнитные явления в Bi_2Te_3 при анизотропном рассеянии». Для кристалла Bi_2Te_3 в слабых электрическом и магнитном полях решено кинетическое уравнение. В основу расчета положена шестиаллипсоидальная модель Дреббла — Вольфа¹⁰. Получены выражения для компонент тензора проводи-

мости $\sigma(H)$ и установлены связи между его коэффициентами, проверка которых может дать информацию о справедливости принятой модели зон и анизотропии рассеяния.

Ф. Г. Б а к ш т «Эффект Фарадея на свободных носителях в Bi_2Te_3 в слабом магнитном поле». В приближении тензора времени релаксации с $\tau \sim E^{-1/2}$ применительно к модели Дреббла — Вольфа решено кинетическое уравнение в слабом магнитном поле; вычислен тензор адмитанса для кристалла Bi_2Te_3 . Полученные формулы применены для вычисления эффекта Фарадея.

В дискуссии М. И. К а г а н о отметил, что аналогичная задача ранее решена им и Ф. Г. Бассом при произвольных магнитных полях (опубликовано в Записках ХГУ).

Г. И. Х а р у с, И. М. Ц и д и л ь к о в с к и й «Анизотропия фотомагнитных эффектов в кубических кристаллах». Теоретически рассмотрена анизотропия фотомагнитных эффектов в кубических кристаллах. Результаты расчетов позволяют объяснить анизотропию, наблюдавшуюся Киконым и Быховским на Ge.

Н. П. К е к л и д з е «Некоторые электрофизические свойства германия и кремния при низких температурах». Формулы, полученные Адировичем, были применены для раздельного определения концентрации акцепторов и доноров в ряде образцов Ge и Si по зависимости постоянной Холла R (или удельного сопротивления) от температуры. Теоретические значения подвижности сопоставлены с экспериментом. Изучена зависимость R и магнитосопротивления от T и H .

В. Б. Ф и к с «Увлечение ионов электронами в полупроводниках». Рассеяние электронов на примесных центрах в электрическом поле создает силу, действующую на центры рассеяния, и эффект увлечения их электронами. Движение нейтральных центров целиком обусловлено увлечением электронами; для заряженных центров сила увлечения вычитается из прямого действия поля на центр. В случае смешанной проводимости нужно учитывать увлечение центров электронами и дырками. Исследование дрейфа нейтральных и заряженных центров может стать независимым методом изучения механизмов примесного рассеяния и диффузии примесей.

И. М. Д ы к м а н, П. М. Т о м ч у к «Электропроводность и термоэлектронная эмиссия в полупроводниках». Методом моментов решено кинетическое уравнение для симметричной и антисимметричной (f_0 и f_1) частей функции распределения электронов в сильном электрическом поле. Решение проведено для квадратичного закона дисперсии с учетом межэлектронного взаимодействия (по Ландау) и рассеяния на фононах и примесях. При достаточно большой концентрации электронов в области не слишком больших энергий f_0 является максвелловской с температурой T_c , превышающей температуру решетки T_0 . При больших энергиях f_0 — максвелловская с температурой $T_c' = T_0$, но со значительно большим предэкспоненциальным множителем. Найдена зависимость подвижности μ и термоэлектрической эмиссии от поля. В области примесного рассеяния μ примерно вдвое больше, чем рассчитанное по функции распределения Фрелиха и Паранджапа.

По мнению Б о н ч - Б р у е в и ч а, высказанному в дискуссии, следует рассматривать также рассеяние на плазмонах с одновременным изменением закона взаимодействия электронов. По оценке И. М. Дыкмана, напротив, при актуальных параметрах рассеяние на плазмонах несущественно.

П. М. Т о м ч у к «Вариационный метод определения электропроводности при учете кулоновского взаимодействия носителей». Сформулирован вариационный принцип для нахождения f_1 , с помощью которого обосновывается метод моментов, использованный в предыдущем докладе.

Ш. М. К о г а н, В. Б. С а н д о м и р с к и й «К теории внешней эмиссии горячих электронов из полупроводников». Для случая, когда энергия ударной ионизации V_i превышает энергию электронного средства ϕ , рассчитана плотность термоэмиссионного тока j из полупроводника с учетом столкновений с акустическими и оптическими фононами в зависимости от поля и температуры решетки T_0 . В сильных полях j растет с понижением T_0 и для германия со сниженной работой выхода может достигать 10^2 амп/см^2 . При $V_i < \phi$ влияние поля на термоэмиссию невелико.

В дискуссии Д ы к м а н высказал мнение, что пренебрежение авторами членом $\sim E^2$ в $f_0 \sim \exp[-(aE + bE^2)]$ (где E — энергия электрона) является необоснованным, а оценка j — завышенной.

В. А. Ч у е н к о «Электропроводность германия при низких температурах в сильных электрических полях». В результате решения кинетического уравнения найдена зависимость темпа ударной ионизации примесных центров и скорости рекомбинации электронов от напряженности электрического поля при низких температурах. Получена вольт-амперная характеристика в области низкотемпературного электрического пробоя, связанного с интенсивной ударной ионизацией мелких доноров. Теория находится в согласии с экспериментом.

В. П. Ш а б а н с к и й «Неравновесные процессы в примесных полупроводниках». Решено кинетическое уравнение для зонных электронов с учетом ударной ионизации примесных центров. Найдены формулы для эффективных температур электронного газа T_e и T_e' в области малых и больших энергий (причем $T_e > T_e' > T_0$), а также для концентрации электронов в зависимости от напряженности поля.

О. Н. Крохин, Ю. М. Попов «Времена замедления неравновесных носителей тока в полупроводниках». Путем рассмотрения кинетического уравнения с учетом фермиевского вырождения показано, что процесс замедления неравновесных носителей тока в полупроводниках состоит из двух стадий: торможения на оптических, а затем на акустических фононах. Для Ge и Si второй этап примерно в 10^2 раз длительнее первого и составляет соответственно $4,5 \cdot 10^{-10}$ и $5 \cdot 10^{-11}$ сек.

В дискуссии Рашба отметил, что для значительных концентраций, при которых актуально вырождение, важную роль должны играть межэлектронные столкновения.

Бонч-Бруевич и Каганов подчеркнули важную роль процессов переброса в полупроводниках с многодолинной зонной структурой в связи с большим изменением импульса при этих процессах. Это в равной мере относится ко всем работам по проблеме горячих электронов. З. С. Грибников отметил актуальность изучения нагревания электронного газа в реальных полупроводниках с учетом их неоднородности, в частности, диффузии носителей в $p-n$ -переходах и влияния приповерхностного инверсного слоя.

4. РЕЗОНАНСНЫЕ И ОСЦИЛЛЯЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ

В ряде работ были рассмотрены особенности поведения носителей в магнитном поле в кристаллах со сложной зонной структурой, развита теория квазиклассического квантования, резонансного поглощения УВЧ-волн и ультразвука зонными носителями, осцилляций магнитной восприимчивости, а также парамагнитного резонанса.

И. М. Лифшиц, В. М. Набутовский, А. А. Слуцкий «Об особенностях движения заряженных квазичастиц вблизи особых точек изоэнергетических поверхностей или траекторий». Рассматривается движение электронов вблизи динамических особых точек, по обе стороны от которых сечения изоэнергетической поверхности плоскостями, перпендикулярными к H , имеют различную связность. В магнитном поле, медленно меняющемся во времени (или пространстве), при сближении односвязной траектории и особой точки происходит рассеяние электрона на одну из ветвей многосвязной траектории; вероятности рассеяния на различные ветви определяются геометрией изоэнергетической поверхности (своеобразное «рассеяние на особой точке»). При наличии статического и низкочастотного магнитного поля возможно резонансное поглощение УВЧ-волн электронами со стационарным во времени периодом обращения $T(dT/dt=0)$, которое особенно усиливается, если одновременно $d^2T/dt^2=0$.

В ответ на вопрос Бонч-Бруевича Лифшиц пояснил, что само по себе «рассеяние на особых точках» не приводит к появлению сопротивления, но при наличии других механизмов рассеяния влияет на проводимость через функцию распределения.

М. Я. Азбелъ «Новый резонансный эффект». В условиях измерения циклотронного резонанса в металлах возникает сложная картина распределения поля по глубине образца с системой острых всплесков, которая на больших расстояниях замещается правильными осцилляциями. Всплески связаны с «заносом» поля электронами, находящимися в резонансе. При вращении магнитного поля, когда на толщине образца укладывается целое число орбит, поверхностный импеданс проходит через экстремум. Для наблюдения эффекта необходима существенная неквадратичность закона дисперсии, малая величина скин-слоя и большая длина пробега. Измерение эффекта должно позволить восстановить ферми-поверхность.

М. Я. Азбелъ «Квазиклассическое квантование вблизи особых классических траекторий и квантовые осцилляции термодинамических величин». Разработана квазиклассическая теория движения электронов вблизи особых точек ферми-поверхности. Показано, что осцилляции термодинамических величин, связанные с деталями структуры ферми-поверхности, например наличием на ней резких выступов или впадин, могут наблюдаться экспериментально и должны иметь сходство с осцилляциями, связанными с наличием малых групп электронов.

Э. И. Рашба, И. И. Бойко, В. И. Шек «Циклотронный и комбинированный резонанс и магнитная восприимчивость некоторых полупроводников». В некоторых полупроводниках экстремум электронных зон может достигаться на окружности в k -пространстве — петле экстремумов. Наличие области отрицательной эффективной массы и бесконечная масса на петле приводят при низких температурах к особенностям циклотронного резонанса в поле, перпендикулярном к плоскости петли: одновременному поглощению правой и левой волн, исчезновению отчетливого резонанса в слабых полях при понижении температуры, осциллирующей зависимости циклотронной частоты от магнитного поля при предельно низких температурах и т. д. В сильных полях, разрывающих спин-орбитальную связь, теория предсказывает появление нового резонанса («комбинированный резонанс» — КР), идущего на частоте спин-резонанса, но возбуждаемого электрическим вектором волны и обладающего интенсивностью, на 7—10 порядков превышающей интенсивность парамагнитного резонанса¹¹; исследована угловая зависимость КР. КР должен наблюдаться и в других полупроводниках.

В частности, построена теория КР для n —InSb, где КР должен обладать более сложным спектром. Исследование нового резонанса должно позволить измерить малое спин-орбитальное расхождение зон. Исследована магнитная восприимчивость полупроводников с петлей экстремумов.

В. Л. Г у р е в и ч, В. Г. С к о б о в, Ю. А. Ф и р с о в «Гигантские осцилляции поглощения звука». Рассмотрен сильно вырожденный электронный газ в магнитном поле $\xi \gg \hbar \Omega \gg kT$ (ξ — химпотенциал). Рассеяние на акустических фононах возможно только с сохранением осцилляторного квантового числа n . Поэтому поглощать фононы могут только электроны, у которых составляющая скорости по магнитному полю равна скорости звука (звуковая волна распространяется вдоль магнитного поля).

С другой стороны, эти электроны должны иметь энергию $\hbar \Omega (n + 1/2) + \frac{p_z^2}{2m} \approx \xi$. Это

условие выполняется для ряда значений магнитного поля, пока $\hbar \Omega n < \xi$. В результате коэффициент поглощения звука будет испытывать сильные осцилляции в зависимости от H .

М. Ф. Д е й г е н, А. Б. Р о й ц и н «Парамагнитный резонанс локализованных в полупроводниках электронов при произвольных значениях статического магнитного поля». Рассчитано сверхтонкое расщепление линий парамагнитного резонанса для произвольной величины статического магнитного поля и, в частности, без поля¹². Найдены правила отбора и интенсивности переходов под действием УВЧ-волны. Получена зависимость частот и интенсивностей поглощения от ориентации кристаллов относительно постоянного и переменного магнитных полей. Приводятся численные результаты для F -центров в KCl и атомов Ag в NaCl.

В. Я. З е в и н «К теории спин-решеточной релаксации электронных центров локализации в неметаллических кристаллах». Сверхтонкое взаимодействие спина электрона со спинами ядер ближайшего окружения рассматривается в качестве причины спин-решеточной релаксации. Найдена вероятность переориентации электронного спина для F -центра в модели LCAO, причем определены изменения коэффициентов линейной комбинации при смещении ближайших ядер. Вероятности переходов рассчитаны как для одно-, так и для двухквантовых переходов при взаимодействии с акустическими фононами. Время релаксации τ изменяется как T^2 и как T^{-7} для $T > \theta$ и $T < \theta$ (θ — дебаевская температура). Для F -центра в KCl при $H \sim 3000$ эрст $\tau \sim 1$ мин. и $\sim 10^{-5}$ сек соответственно для $T = 4^\circ \text{K}$ и 300°K .

Отвечая на вопрос К. Б. Т о л п ы г о, В. Я. З е в и н сказал, что влияние магнитного поля тона колеблющихся ядер на релаксацию незначительно, а эффект спин-орбитального взаимодействия должен быть оценен.

Ю. В. Ч х а р т и ш в и л и «Спин-электронный резонанс на F -центре в кристалле KCl+NaCl». Методом LCAO определена ψ -функция F -центра в KCl для случая, когда один из шести катионов, окружающих хлорную вакансию, замещен натрием. По найденным коэффициентам линейной комбинации рассчитывается сверхтонкое расщепление резонансной линии. Полоса состоит из 208 линий, из которых наиболее интенсивны 16. Расстояние между крайними линиями достигает 106 эрст.

5. ТЕОРИЯ ЛОКАЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ И ПОЛЯРОНОВ

К этому кругу вопросов относились доклады, посвященные развитию математических методов расчета, теории примесного поглощения и люминесценции и теории поляронов.

К. К. Р е б а н е, О. И. С и л ь д «Метод моментов в теории электронно-колебательных переходов». Разработана формулировка метода моментов, имеющая технические преимущества перед техникой М. Лэкса¹³; получены общие формулы для моментов распределения вероятностей квантовомеханических переходов. Результаты применены к теории примесного поглощения. В кондоновском приближении рассчитаны первые три момента полосы для локального центра с учетом изменения частот при фотопереходе и ангармонизма.

В. М. Б у й м и с т р о в «Вариационный принцип для вероятностей переходов». Точность приближенных расчетов квантовомеханических вероятностей переходов может быть значительно увеличена путем замены обычных функционалов новыми функционалами, которые совпадают с обычными на точных волновых функциях и (в отличие от обычных) стационарны по этим функциям. Выведено дифференциальное уравнение, к решению которого сводится задача построения стационарных функционалов. Метод применим к широкому кругу квантовомеханических задач.

С. В. Т я б л и к о в, В. А. М о с к а л е н к о «Применение методов теории поля в теории многофононных переходов». Вероятности оптических и безызлучательных переходов в локальных центрах выражаются через температурно-временные функции Грина, для которых применение статистической теоремы Вика приводит к простой системе дифференциальных уравнений; этим методом, например, легко может быть

учтено малое изменение частот при фотопереходах. Предложенная техника может быть применена к широкому кругу задач.

Ю. Е. Перлин, А. Е. Маричук, В. А. Коварский «Применение теории возмущений Вигнера — Вайскопфа к задачам электронно-фононного взаимодействия в кристаллах». Рассмотрено рассеяние света электроном примесного центра при сильном взаимодействии с фононами. Предполагается, что между актами поглощения и испускания света не происходит фононной релаксации. В отсутствие дисперсии фононов спектральная кривая излучения оказывается шире, чем в теории Пекара, с такой же площадью и тем же положением максимума. Безызлучательные переходы из виртуальных состояний обуславливают температурную зависимость квантового выхода люминесценции.

Дана теория термолюминесценции, связанной с предварительным туннельным переходом электрона из мелкой ловушки на возбужденный уровень глубокой (наприммер, при реакции $F' \rightarrow 2F$). Получены спектральная кривая и температурная зависимость скорости реакции.

Рассмотрено примесное рассеяние электронов через виртуальный однофононный захват на мелкие дискретные уровни. Этот механизм может доминировать при низких температурах в случае больших поперечников захвата.

Во время дискуссии К. К. Ребане и Э. И. Рашба заметили, что в отсутствие фононной релаксации форма кривой люминесценции будет зависеть от частоты облучения, определяющей степень возбуждения колебательной системы. По мнению Кристоффеля, Толпыго и Каганова, время релаксации фононов вследствие ангармонизма ($\sim 10^{-12} - 10^{-11}$ сек) много меньше времени высвечивания ($\sim 10^{-8}$ сек) и релаксация всегда будет иметь место. Пекар указал, что даже в чисто гармоническом приближении неравновесная деформация кристаллов вблизи возбужденного примесного центра неизбежно исчезнет за время порядка нескольких периодов колебания решетки вследствие распыливания волнового пакета оптических колебаний.

А. М. Ратнер, Г. Е. Зильберман «К теории люминесценции кристаллов с примесными центрами свечения». Форма полосы примесного поглощения рассматривается в предположении, что в центре малого радиуса электрон взаимодействует с небольшим числом колебательных координат, и с учетом изменения квазупругих межатомных сил при фотопереходе. Теория объясняет асимметрию полос поглощения и отклонение от закона зеркальности полос поглощения и люминесценции.

Отвечая на вопросы Пекара, Черлина, Ребане и др., А. М. Ратнер настаивал на преимуществе данного метода перед методом нормальных координат, так как при этом фигурирует небольшое число параметров.

А. А. Церцвадзе «О механизмах поглощения света F -центрами и экситонами в щелочно-галогидных кристаллах». Рассчитывается энергия, необходимая для перевода электрона от катиона, ближайшего к галогидной вакансии, на катион следующей сферы. Эта энергия сопоставляется с расстоянием между первым и вторым пиками собственного поглощения. Рассчитана также энергия перехода электрона от галогидного иона на соседний с вакансией, которая сопоставлена с энергетическим положением α -полосы.

В дискуссии М. Ф. Дейген и К. Б. Толпыго заметили, что для получения количественных результатов в теории экситонов необходимо учитывать переход электронов также на s -уровни соседних галогидов, а кроме того, различные состояния дырки в p -оболочке галоида.

А. Г. Чебан «К теории термоионизации F' -центров». Вычислена вероятность термоионизации F' -центров в NaCl и KCl с учетом поляронного эффекта, а также поперечник захвата поляронов F -центром.

Д. Н. Абакаров, Ю. М. Сеидов «К теории магнитной восприимчивости поляронного газа». Вычислена магнитная восприимчивость χ поляронного газа в слабых полях при слабой электрон-фононной связи. При низких температурах для χ получается формула, отличающаяся от формулы Ландау заменой электронной массы m

на массу полярона $M = m \left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)$. При высокой температуре эффективная масса, определенная из магнитной восприимчивости, зависит от T .

В. Л. Винецкий «Основное состояние биполярона». С помощью вариационного принципа показано, что в кристаллах с $n^2 \ll \epsilon$ (металл-аммиачные растворы, сегнетоэлектрики) минимум энергии двух поляронов может достигаться при конечном расстоянии между их центрами. Вычислена энергия, обязанная обменному вырождению и взаимодействию каждого электрона с поляризацией, созданной другим.

В дискуссии Каганов заметил, что обмен акустическими фононами должен дать вклад $\sim -\frac{1}{R}$ в энергию двух поляронов. Если эта величина превосходит кулонов-

ское отталкивание $\frac{1}{\epsilon R}$, то возможны связанные состояния большого радиуса.

Р. Р. Догонадзе, А. А. Черненко «Электропроводность полупроводников с малой длиной пробега носителей». Вычислена электропроводность полупроводника с малой подвижностью носителей, являющихся поляронами малого радиуса. Расчет представляет собой обобщение работы Т. Холстейна¹⁴ и не требует предположения, что при локализации электрона на некотором узле смещаются только ближайшие соседи. Рассмотрена температурная зависимость электропроводности.

В дискуссии Раппа отметил, что в случае низких температур аналогичная задача была им исследована применительно к экситонам¹⁵, и обратил внимание на трудности, связанные с исследованием температурных зависимостей.

6. ТЕОРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

Небольшая группа работ относилась к динамике кристаллических решеток, релаксации радиационных дефектов и росту кристаллов.

К. Б. Толпыго «Дальнодействующие кулоновские силы в динамике гомеоплярных кристаллов типа алмаза». Обсуждается роль и величина диполь-дипольных взаимодействий в неполярных кристаллах и связь смещений ядер с поляризацией атомов. В области длинных волн эта связь невелика и ответственна за двойное лучепреломление, появление нескольких ветвей электромеханических колебаний вблизи предельной частоты и т. д.¹⁶. Для коротких волн она обуславливает дальнодействующие силы между незаряженными атомами, без существования которых нельзя объяснить экспериментально найденную дисперсию $\omega(k)$. Дается вывод потенциальной энергии кристалла в адиабатическом приближении, уточняющий прежние результаты¹⁷ и обосновывающий вид взаимодействия, предположенный В. Кокраном¹⁸. Отмечается большая величина поляризационных эффектов в Si и Ge. Приведены результаты оценки параметров и расчета собственных частот, проведенного Т. И. Кучер и З. А. Демиденко.

В. С. Оскотский, А. И. Эфрос «К теории кристаллических решеток с нецентральной межатомным взаимодействием». Исследуются условия, налагаемые на динамические матрицы кристалла требованием отсутствия начальных напряжений и инвариантности плотности энергии кристалла относительно его вращения. Предполагается наиболее общий вид взаимодействия в гармоническом приближении в зависимости от относительных смещений каждой тройки атомов. Методом статической деформации получены выражения для упругих постоянных. В отсутствие начальных напряжений они совпадают с полученными по методу длинных волн.

Б. Я. Юрков «К теории отжига радиационных дефектов». Проведено обобщение теории Уэйта отжига радиационных дефектов в направлении учета рекомбинации генетически не связанных вакансий и внедренных атомов. Полученное решение правильно описывает процесс при больших временах отжига и для Si приводит к радиусу захвата $\sim 20\text{\AA}$.

М. Я. Дашевский, М. С. Миргаловская «О росте и структуре монокристаллов $A^{III}Sb$ ». При огранке кристалла плоскостями $\{111\}$ могут быть поверхности типа A , на которые выходят атомы A , и типа B , на которые выходят атомы Sb . Свойства этих поверхностей существенно различны, и скорости выращивания монокристаллов $InSb$ в направлениях (111) , $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ и обратных им неодинаковы. Возможны существенные отклонения кристаллов $A^{III}Sb$ от стехиометричности. Предложена модель строения поверхности огранки A , в которой атомы In не обладают тетраэдрической электронной конфигурацией.

7. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В настоящем разделе объединены работы по феноменологической теории рекомбинации фотоносителей, приповерхностных явлений и магнитосопротивления образцов конечных размеров.

И. А. Мирцхулава «Исследование локальных центров захвата при помощи длительного возбуждения полупроводника светом». Решены кинетические уравнения для числа электронов в зоне проводимости и на локальных уровнях непосредственно после включения и выключения освещения. При равенстве сечений захвата электронов двумя сортами локальных центров нелинейные уравнения решаются точно, а в общем случае — приближенно. Сопоставление кривых нарастания и спада кривых фототока с теоретическими позволяет определить параметры локальных центров.

Э. И. Адирович «Кинетика примесной фотопроводимости и новый метод определения эффективных сечений локальных центров». Исследована кинетика фотопроводимости, когда в полупроводнике образуются носители тока только одного знака. Поскольку при этом явление не осложнено дрейфом, поверхностной и ступенчатой рекомбинацией и высвобождением носителей и формулы относительно просты.

предлагается использовать этот эффект для измерения поперечников рекомбинации различных центров по частотной зависимости фототока.

Ю. В. Гуляев «Статистика электронов и дырок в полупроводниках с дислокациями». На основе качественных представлений об энергетическом спектре дислокационных уровней определяется степень заполнения дислокаций электронами в зависимости от температуры и положения уровня Ферми. В результате распространения рекомбинационной статистики Шокли — Рида на дислокационные уровни выводится формула для времени жизни неосновных носителей.

Б. М. Фридкин «О феноменологической теории фотоэлектрического состояния кристаллов». Фотоэлектрическое состояние возникает в кристалле при одновременном действии на него света и электрического поля. Процесс образования фотоэлектрического состояния описывается с помощью схемы, содержащей уровни прилипания для электронов; обсуждаются критерии выполнения закона взаимозаместимости.

Г. М. Гуров «Энергетическая структура поверхностного слоя объемного заряда в полупроводниках». Потенциал, создаваемый приповерхностным слоем объемного заряда, образует потенциальную яму для электронов. Когда характеристические размеры этой ямы становятся меньше дебройлевской длины волны и длины свободного пробега электрона, необходимо учитывать квантовые явления. В этом случае спектр состоит из системы приповерхностных зон. Оценено влияние рассмотренного эффекта на приповерхностную проводимость.

Ю. И. Горкун «О влиянии токовых электродов на магнитное сопротивление». В приближении слабого магнитного поля найдено распределение потенциала в прямоугольном образце с учетом его конечных размеров и закорачивающего действия электродов. Указаны геометрические критерии, соблюдение которых необходимо для правильного измерения магнитосопротивления.

Ю. А. Вдовин, Б. М. Графов, В. А. Мямлин, В. Г. Левич «Свойства границы двух фаз электролит — полупроводник». Построена теория прохождения тока через контакт электролита и полупроводника (с биполярной и монополярной проводимостью). Процессы в полупроводнике описываются с помощью уравнений диффузионной теории, а на границе — с помощью полуэмпирической формулы теории замедленного разряда; получены характеристики, обнаруживающие эффект выпрямления. Вычислена скорость растворения полупроводника при прохождении тока; теория применена к Ge и Si. Рассмотрена поверхностная проводимость контакта электролит — полупроводник.

8. ТЕОРИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ

В. М. Вальд-Перлов, А. В. Красилов, М. Е. Лисогорский и В. Л. Аронов «Параметрические диоды. Расчет параметров». Исследована связь характеристик параметрических усилителей с параметрами полупроводниковых диодов для нахождения их оптимальных значений. Рассмотрены различные типы диодов (с различной геометрией и распределением примесей в базе) и различные режимы работы (случаи гармонически изменяющихся напряжений или токов).

Д. А. Аронов, П. С. Карагеоргий-Алкалаев «Об одном возможном механизме объяснения роста обратного тока с напряжением в полупроводниковом диоде». Построена диффузионная теория прохождения обратного тока через полупроводниковый диод, справедливая при произвольном расстоянии w между p — n -переходом и одним из металлических электродов (расстояние до второго электрода предполагается достаточно большим). Учитывается генерация носителей в области объемного заряда в p — n -переходе и на контакте с металлом. В пределе при малом w получаются формулы теории химического запирающего слоя¹⁹, а при большом w — теории толстых диодов²⁰.

М. И. Маркович, Н. М. Ройзин «О влиянии геометрии базы транзистора на его переходные характеристики». В режиме насыщения в пассивной области базы происходит накопление неосновных носителей. Их время жизни значительно превосходит время жизни в активной области базы, так как они могут перемещаться только под влиянием диффузии. Наличие большого числа непрорекомбинирующих неосновных носителей приводит к самооткрыванию транзисторов в триггерных схемах. Это явление может быть использовано для измерения времени жизни в пассивной области базы.

А. Л. Захаров «Теоретическое исследование вольт-амперных характеристик инжекции в запиорный слой». Развита упрощенная теория спасистора с точечным и линейным эмиттером; получены формулы для крутизны характеристики и коэффициента усиления.

Ю. С. Рябинкин «Электрическое поле в полупроводнике между переходами по типу проводимости». Приближенно исследовано распределение поля в квазинейтральной части базового слоя триода в пренебрежении рекомбинацией носителей при плоской геометрии. Оценен эффект объемного заряда.

Ю. С. Р я б и н к и н «Влияние диффузии носителей тока на коэффициент передачи полевого *p**n*-транзистора». Теоретически рассмотрено влияние диффузии носителей на частотные характеристики транзистора с сильным полем E в базе, в котором электроны дрейфуют с предельной скоростью. По функции распределения, найденной В. А. Чуенковым, вычислен коэффициент диффузии $D \sim E^{-1/3}$. Диффузия носителей устлавливает частотный предел усиления.

В дискуссии З. С. Грибников и В. Б. Сандомирский отметили, что формулы теории горячих электронов для однородных образцов нельзя непосредственно переносить на неоднородные системы с градиентами концентрации и электронной температуры.

Следует заметить, что работы по теории приборов посвящены рассмотрению частных вопросов, не затрагивают новых принципов работы полупроводниковых приборов и недостаточно связаны с изучением физических процессов в полупроводниках. Нельзя не пожалеть также о почти полном отсутствии на конференции ведущих физиков-экспериментаторов, специалистов по полупроводникам.

В заключительном слове С. И. Пекар констатировал значительные успехи, достигнутые в области кинетики электронов в зоне проводимости, магнитных и резонансных явлений, в теории экситонов, локальных центров и поляронов. Недостаточно активно ведутся работы по расчету энергетических зон, многоэлектронной теории кристаллов и обоснованию зонной схемы. Не разрабатывается проблема носителей тока с малой подвижностью. Недостаточна связь теоретиков с экспериментаторами, как это видно, в частности, из малого участия экспериментаторов в данном совещании и совершенно недостаточного количества работ по теории полупроводниковых приборов.

От имени участников Пекар выразил глубокую благодарность тбилисской группе оргкомитета во главе с А. И. Гачечиладзе за прекрасную подготовку и организацию работы совещания.

В принятой совещанием резолюции отмечается сильная централизация исследований по теории полупроводников в Москве, Ленинграде и Киеве и необходимость более широкого развертывания работ в столицах национальных республик и других городах Советского Союза. Необходимо развертывать исследования, прежде всего, по изучению сложной зонной структуры полупроводников, резонансных явлений, кинетики носителей тока (включая проблемы малых подвижностей, горячих электронов, рекомбинации и безызлучательных переходов) и физики несовершенных кристаллов. Необходимо развивать новые математические методы, в частности перенесенные из теории поля, а также широко внедрять машинную математику.

Высказано пожелание собрать следующее совещание в 1962 г. в Кишиневе.

Э. И. Рашба, К. Б. Толпыго

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. С. И. Пекар, ЖЭТФ 33, 1022 (1957).
2. Е. Ф. Гросс, А. А. Каплянскй, Физика твердого тела 2, 379 (1960).
3. И. С. Горбань, В. Б. Тимофеев, Доклад на XIII Всесоюзном совещании по спектроскопии, Ленинград, июль 1960 г.
4. М. С. Бродин, С. И. Пекар, ЖЭТФ 38, 74, 1910 (1960).
5. D. G. Thomas, J. J. Hopfield, Phys. Rev. Lett. 4, 357 (1960).
6. В. М. Буймистров, С. И. Пекар, ЖЭТФ 32, 1193 (1957); В. М. Буймистров, Укр. физ. ж. 3, Прил. I, 21 (1958).
7. Г. Я. Любарский, О. В. Ковалев, ЖТФ 28, 1151 (1958).
8. Л. Э. Гуревич, Э. И. Урицкий, Физика твердого тела 1, № 8 (1959).
9. E. N. Adams, T. D. Holstein, J. Phys. Chem. Solids 10, 254 (1959).
10. I. R. Drable, K. Wolfe, Proc. Phys. Soc. B 69, 1101 (1959).
11. Э. И. Рашба, Физика твердого тела 2, 1224 (1960).
12. М. Ф. Дейген, А. Б. Ройцин, ЖЭТФ 36, 176 (1959).
13. M. Lax, J. Chem. Phys. 20, 1752 (1952).
14. T. Holstein, Ann. Phys. 8, 325, 343 (1959).
15. Э. И. Рашба, Изв. АН СССР, сер. физ. 21, 37 (1957); Оптика и спектроскопия 3, 568 (1957).
16. В. С. Машкевич, К. Б. Толпыго, ДАН СССР 111, 575 (1956).
17. В. С. Машкевич, К. Б. Толпыго, ЖЭТФ 32, 520 (1957).
18. W. Soshan, Proc. Roy. Soc. A253, 260 (1959).
19. А. И. Губанов, Теория выпрямляющего действия полупроводников, М., Гостехиздат, 1956.
20. Э. И. Рашба, К. Б. Толпыго, ЖТФ 25, 1335 (1955).

