

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУКСОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ**V ВСЕСОЮЗНОЕ СОВЕЩАНИЕ ПО ТЕОРИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

С 29 октября по 3 ноября 1962 г. в г. Баку состоялось V Всесоюзное совещание по теории полупроводников, созданное Комиссией по полупроводникам АН СССР совместно с Академией наук Азербайджанской ССР и Азербайджанским гос. университетом им. С. М. Кирова. В совещании приняло участие свыше 250 человек, представлявших научные учреждения 23 городов Советского Союза: Москвы, Ленинграда, Киева, Баку, Вильнюса, Тарту, Кишинева, Тбилиси, Ташкента, Харькова, Казани, Томска, Свердловска, Одессы, Черновиц и др. Из 96 представленных докладов Оргкомитет отобрал 37, доложенных на пяти общих заседаниях и двух вечерних семинарах более узкого состава.

В большинстве докладов обсуждались вопросы зонной структуры полупроводников, теории гальвано- и термомагнитных явлений, различных резонансных эффектов, проблемы полупроводников с малой подвижностью и оптических свойств кристаллов. Участники совещания с большим интересом выслушали обзорные доклады С. И. Пекара, Л. В. Келдыша (на первом заседании) и В. Е. Харцева (на семинаре) о работе Международной конференции по физике полупроводников в Экзетере (Англия).

Общим впечатлением от Экзетерской конференции является то, что экспериментальное исследование полупроводников в Советском Союзе заметно отстает от проводимого за рубежом, особенно в США. По ряду же направлений, как, например, по расчетам зонной структуры, имеется отставание и в области теории.

1. ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Этой проблеме было посвящено наибольшее число докладов. В. Л. Бонч-Бруевич, И. П. Звягин, А. Г. Миронов (МГУ, Москва) в работе «О теории сильнолегированных полупроводников» нашли плотность состояний $\rho(\omega)$ в окрестности дна зоны проводимости полупроводника, содержащего большое количество беспорядочно распределенной примеси. Суммарный потенциал примеси предполагался медленно изменяющейся функцией. Взаимодействие электронов учитывалось с помощью известных разложений, причем параметром малости служила величина $\lambda = (na_0^3)^{-1/3}$, где n — концентрация примеси, a_0 — радиус экранирования. При энергиях больших границы зоны проводимости $\omega = 0$ $\rho(\omega)$ изменяется как $\omega^{1/2}$, при $\omega \approx 0$ — линейно и приближается к нулю для $\omega < 0$ как $\exp\left[-\frac{\omega_0}{\omega} \left|\ln\left|\frac{\omega}{\omega_0}\right|\right|\right]$. Плотность уровней под дном зоны существенно зависит от характера распределения примеси и вычисляется без учета корреляции в распределении.

Ту же задачу сходными методами решил Л. В. Келдыш (ФИАН, Москва) в работе «Энергетический спектр сильнолегированных полупроводников». В качестве малого параметра рассматривалась величина $\alpha = na_B^3$, a_B — радиус основного состояния электрона в кристалле в кулоновском поле примеси. При $\alpha \ll 1$ получается дискретный отрицательный уровень $\varepsilon = \varepsilon_0$ и зона с плотностью $\rho \sim \sqrt{\varepsilon}$ для $\varepsilon > 0$. С ростом α возникает примесная зона с размытыми краями (вследствие беспорядка в распределении примеси), сливающаяся в дальнейшем с зоной проводимости. При $\alpha \gg 1$ кулоновский потенциал примеси следует заменить экранированным потенциалом, и ввиду сильного рассеяния для электронов малых энергий нужно суммировать все диаграммы, так как импульс, даже приблизительно, не является квантовым числом. Плотность локальных уровней при $\varepsilon \sim \varepsilon_0$ изменяется как $\left|\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon - \varepsilon_0}\right| \ln\left|\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon_0}\right|$, а под дном зоны убывает как $\exp(-(\varepsilon/\Delta)^2)$, что связано с гауссовым характером распределения флуктуаций плотности примеси. Величина Δ пропорциональна $\varepsilon_0 \alpha^{5/13}$. Отвечая на вопрос М. Я. Азбеля, докладчик утверждал, что пренебрежение корреляцией в распределении примесей

законно даже при больших ее концентрациях, так как величина a_B во много раз больше размеров атомов. Причина различия в форме $Q(\epsilon)$ в этой и предыдущей работах для уровней, лежащих под дном зоны, при одинаковых предпосылках остается невыясненной, несмотря на тщательную проверку расчетов в обоих работах.

В объединенном докладе В. А. Чалдышева, Н. В. Кудрявцевой, Г. Ф. Каравеева (ФТИ, Томск) «К вопросу об исследовании энергетического спектра электронов в кристалле» был изложен общий метод качественного исследования, основанный на свойствах симметрии кристалла и позволяющий получить приближенный закон дисперсии во всей зоне с помощью аппроксимирующих функций со свободными параметрами, определяемыми из сравнения с опытом. Исследован закон дисперсии в кристаллах типа Th_3P_4 в симметричных точках, а также в решетках типа алмаза и сфалерита — во всей зоне. В работе К. Д. Товстока, Д. Е. Гермуса и М. В. Тарнавской (ЧГУ, Черновцы) «Исследование законов дисперсии носителей тока в кристаллах полупроводников типа O_h^5 , O_h^6 , D_{2h}^{15} » также изучались законы дисперсии в окрестности симметричных точек названных кристаллов с помощью теории групп.

К. Б. Толыго (ИПАН, Киев) в докладе «Рассмотрение движения носителя тока в кристалле как задача многих электронов» предложил метод расчета зонной структуры полупроводника, когда движение лишнего электрона (дырки) от узла к узлу можно считать достаточно медленным, в сравнении с частотой его обращения вокруг каждого ядра. Это позволяет приближенно учитывать корреляции в движении всех электронов кристалла при перемещении избыточного заряда как переполяризацию всех атомов. Оценен вклад этой корреляции в закон дисперсии $E(k)$. Были приведены результаты расчетов этим методом электронных зон в NaCl и KCl и дырочных зон в Ge при учете спин-орбитального взаимодействия. Для электронных зон в Ge метод в предложенной форме оказался неприменимым вследствие узости запрещенной зоны. Выступая в дискуссии, М. И. Каганов выразил сомнение в целесообразности и возможности сколько-нибудь точного расчета зонной структуры. По его мнению, к которому присоединился и Бонч-Бруевич, предпочтительнее теоретическая разработка методов экспериментального исследования зонной структуры.

Доклад Е. И. Чегловой (СФТИ, Томск) «Структура валентных зон кристаллов гексагонального селена и теллура» был посвящен возможному обобщению уравнений Хартри — Фока путем отказа от предположения о двукратной занятости пространственных орбит электронами. При учете спин-орбитального взаимодействия в кристаллах Se и Te получается более богатая схема валентных зон, позволяющая объяснить особенности поляризованного инфракрасного поглощения за счет переходов внутри этих зон. Ряд выступавших отметили, что физические соображения, соответствующие выбранной автором волновой функции кристалла, недостаточно ясны.

Работы В. Е. Харцева (ФТИ, Ленинград) «Оптические свойства и структура энергетических зон некоторых полупроводников соединений» и И. Б. Левина (ИФМ, Вильнюс) «Химическая связь и структура энергетических зон в записи меди» характерны тем, что при анализе зон используются не только свойства симметрии, но и связанные с ними кристаллохимические особенности веществ. В первой работе теоретико-групповые соображения сопоставляются с расчетами упрощенным методом ОПВ и методом локализованных орбит и с экспериментальными данными по оптическим свойствам. Это позволяет сделать ряд выводов: в полупроводниках типа SnS имеются минимумы в точках Γ и V ; в точке Γ существуют четыре пары невырожденных уровней, между которыми возможны два дипольных перехода. В точке V уровни двукратно вырождены (без учета спина). В полупроводниках CdSb и ZnSb максимум валентной зоны находится в точке Γ (причем возможно наличие двух сортов дырок), а минимумы зоны проводимости лежат в точках Γ и R . В соединениях CdSnAs_2 имеется тороидальная изоэнергетическая поверхность в валентной зоне. В работе И. Б. Левина сона детально изучалась кристаллохимия записи меди и было показано, что ионная и валентная составляющие ответственны за химическую связь примерно в равной мере. Ряд соображений, основанных на квантовохимическом анализе связи, показывает, что $3d$ -электроны меди не участвуют в образовании химической связи и валентной зоны. Рассмотрена симметрия и расположение зон в предельных случаях ковалентной и чисто ионной связи. При этом показано, что ионные модели Эллиота и Жилича содержат ряд непоследовательностей. На основе предельных случаев сделаны выводы о симметрии и расположении зон в истинном промежуточном случае. Сопоставление этих выводов с последними экспериментами позволяет решить вопрос об участии атомных состояний в образовании энергетических зон.

В работе А. Б. Алмазова (ИОНХ, Москва) «Тэта-разложения законов дисперсии для квазичастиц в кристаллах» было предложено разлагать зависимости $E(k)$ не в ряд Фурье, как это автоматически получается в приближении сильной связи, а в ряд по тэта-функциям. При этом уже один член ряда учитывает бесконечное число координационных сфер. Тэта-разложения особенно удобны в применении к формулам дисперсии для фононов.

2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

В большей части работ этого направления разрабатывалась теория собственного и примесного поглощения видимого и инфракрасного света. В трех докладах рассматривалось поглощение СВЧ при наличии магнитного поля (резонансные эффекты) и в одном — теория отражения и прохождения света через поверхность кристалла при наличии поверхностных экситонов. В этом докладе — «Влияние поверхностных экситонов на оптические свойства кристаллов» (С. И. Пекар, ИПАН, Киев) — рассматривался предельный случай, когда мнимая часть составляющей волнового вектора экситона, нормальной к поверхности κ , много меньше обратной постоянной решетки. Тогда экситонные состояния вносят дополнительный вклад в объемный ток, вызываемый электромагнитной волной, а поле вблизи поверхности описывается суперпозицией плоских волн с действительными и комплексными волновыми векторами с равными (действительными) тангенциальными составляющими. Наличие поверхностных волн изменяет вид граничных условий для объемных волн и приводит к обобщению формул Френеля. Это изменение оказывается существенным даже при частотах, отличных от частот, соответствующих образованию поверхностного экситона, а вблизи резонанса появляется узкая линия полного отражения. Теория предсказывает эллиптическую поляризацию проходящего света в отсутствие поглощения. В дискуссии Ф. Г. Басс, М. И. Каганов и др. высказали сомнение в существовании поверхностных экситонов, макроскопически протяженных в направлении, перпендикулярном к поверхности. По их мнению, предпочтительнее формулировать новое граничное условие, учитывающее наличие поверхностных экситонов. Как подчеркнул докладчик, последнее возможно, только если κ во много раз больше волнового вектора добавочной световой волны.

Теории инфракрасного поглощения был посвящен доклад Л. Э. Гуревича и И. П. Ипатовой (ФТИ, Ленинград) «К теории ширины линии резонансного поглощения в ионных кристаллах». Ширина линии Γ , обусловленная ангармонизмом, рассчитывалась методом температурных функций Грина с применением диаграммной техники Абрикосова и др. В пределе высоких температур кубические ангармонические члены приводят к пропорциональности Γ и T , а члены IV порядка приводят к зависимости $\Gamma \sim T^2$. Поскольку в последнем случае число комбинаций фононов, для которых суммарная энергия равна $\hbar\omega$, гораздо больше, то роль членов III и IV порядков может быть сравнимой. Опыт дает зависимость $\Gamma \sim T^\alpha$ с $1 < \alpha < 2$. Отвечая на вопрос Ю. Е. Перлина, И. П. Ипатова подчеркнула, что применение к данной задаче Вигнера — Вейскопфа, в котором учитывается только распад, но не восстановление начального состояния, дает неверный результат $\Gamma \sim T^3$.

В теории поглощения и люминесценции примесных центров основной задачей в доложенных работах являлось получение правильной величины интенсивности, а также формы полосы при различных температурах. Здесь, как правило, применяется адиабатическое приближение при рассмотрении быстрой (электронной) и медленной (фононной) подсистем, когда можно ввести адиабатический потенциал, обычно параболической формы, различающийся для основного и возбужденного состояний легкой подсистемы. Это различие при одновременном учете квантовой неопределенности координат осцилляторов и обуславливает уширение полос. Основную трудность представляет учет изменения кривизны потенциала, т. е. частот фононов при фотопереходе.

Доклад К. К. Ребане, Р. А. Праэм, А. П. Пурга, О. Н. Сильд и В. В. Хижнякова (ИФА, Тарту) «Некоторые задачи об участии колебаний решетки в электронных и внутриядерных переходах в кристаллообразующих частицах» посвящен изучению влияния локальных и кристаллических колебаний (ЛК и КК) на электронные и ядерные спектры. Высокотемпературные эксперименты по люминесценции и поглощению примесных центров дают сравнительно мало сведений о примесном центре. Более перспективными с этой точки зрения являются квазилинейчатые спектры, наблюдаемые при низких температурах (например, эффект Шпольского и спектры редкоземельных ионов в ионных кристаллах; эффект Мёссбауэра). Переходы, связанные с изменением числа квантов КК, приводят к непрерывному фону; переходы, при которых меняется только число квантов ЛК и совсем не меняется колебательное состояние КК, приводят к отдельным линиям на фоне непрерывных полос. При умеренных Stokes'овых потерях появляется ряд линий, связанных с участием только ЛК. Аналогично в эффекте Мёссбауэра (в неидеальном кристалле), кроме резонансной линии, могут возникнуть линии, связанные с возбуждением ЛК, которые в принципе могут по интегральной интенсивности превосходить основную линию. На вопросы Ю. Е. Перлина, В. А. Москаленко и др. К. К. Ребане ответил, что эффект изменения частот при возбуждении был учтен и что он в эффекте Шпольского невелик. Различие же полуширин поглощения и люминесценции отнюдь не обязательно связано с наличием ЛК. Оно может возникнуть и в отсутствие локальных колебаний в центре малого радиуса за счет изменения упругих постоянных. Кроме того, заметный вклад может дать

кратность возбужденного электронного уровня, а также аягармонизм колебаний. Более подробное изложение результатов по теории эффекта Мёссбауэра содержалось в работе В. В. Х и ж н я к о в а (ИФА, Тарту) «Некоторые расчеты процессов резонансного поглощения и излучения γ -квантов ядрами в кристалле».

Близким вопросам был посвящен доклад С. В. Т я б л и к о в а, В. А. М о с к а л е н к о и М. Е. П о л и с т р а н т (МИАН, Москва; ИФАН, Кийшинев) «К теории оптических полос в кристаллах». В этой работе применяется методика квантовых функций Грина, которая позволяет учитывать наряду со сдвигом осцилляторов из положения равновесия также и эффекты, связанные с изменением частот колебаний решетки при электронном переходе. Найдем температурный ход смещения Δv максимума полосы поглощения F -центра благодаря частотному эффекту. Учет изменения частот приводит также к дополнительному уширению полосы (при высоких температурах имеет место $\Delta v \sim T$).

В докладе Н. Н. К р и с т о ф е л я и Г. С. З а в т а (ИФА, Тарту) «Приближение Кондона и оптические свойства примесных центров» с помощью теории групп рассматриваются эффекты, связанные с отступлением от приближения Кондона (ПК) в теории примесных центров. Если одно из состояний полностью симметрично, то запрещенный дипольный переход в состоянии симметрии Γ_B разрешается колебаниями той симметрии Γ_μ , которая содержится в $\Gamma_B \times \Gamma_{1u}$, поляризация перехода совпадает с поляризацией разрешенных переходов $\Gamma_B \rightarrow \Gamma_\mu$. Аналогично рассмотрены безызлучательные переходы, вызванные оператором неадиабатичности. Показано, кроме того, что если ПК нарушается колебанием, активным в эффекте Яна — Теллера, то расщепление Яна — Теллера может проявиться и в спектре поглощения. Это имеет место, если $\Gamma_B \times \Gamma_{1u}$ и $[\Gamma_B^2]$ содержат одно неждествовное неприводимое представление колебаний квазимолекулы. При обсуждении В. А. М о с к а л е н к о отметил, что аягармонизм колебаний приводит в квадратичном приближении по смещениям нормальных координат u_μ от равновесных положений u_μ^0 к дополнительному эффекту изменения частот. Кроме того, при обсуждении было отмечено, что в вопросах такого рода отклонения от принципа Кондона, неадиабатичность и эффект Яна — Теллера должны рассматриваться совместно.

При резонансном поглощении СВЧ в магнитном поле ранее рассматривались отдельно поглощение, связанное с орбитальным движением электронов (циклотронный резонанс — ЦР), и поглощение, связанное с изменением спинового состояния (парамагнитный резонанс — ПР). В действительности благодаря спин-орбитальному взаимодействию эти эффекты тесно связаны и имеют место так называемый комбинированный резонанс КР.

В работе Г. Л. Б и р а, Е. Б у т и к о в а и Г. Е. П и к у с а (ИПАН, Ленинград) «Парамагнитный и комбинированный резонанс на акцепторных центрах в недеформированных и деформированных кристаллах типа p -германия» рассматривается влияние деформации на резонансные эффекты. В недеформированном кристалле при отсутствии внешних полей основное состояние акцепторного центра четырехкратно вырождено, так же как валентная зона при $k=0$. При деформации e уровень расщепляется на два с энергиями $\pm \Delta_e$. Между этими деформационными уровнями возможны переходы под влиянием переменных электрического или магнитного полей. При наложении постоянного магнитного поля H каждый из деформационных уровней расщепляется на два спиновых, причем расщепление обоих деформационных уровней различно. Наблюдаемый ПР обусловлен переходом между нижними уровнями. Для них рассчитана зависимость g -фактора от направления e и поправки к нему, пропорциональные e и появляющиеся во втором порядке теории возмущений. Сравнение с экспериментом позволяет установить g -факторы различных акцепторов и знак констант деформационного потенциала для связанных дырок. В недеформированном кристалле ширина линии резонанса определяется взаимодействием с акустическими колебаниями. Переходы между спиновыми уровнями при этом разрешены в первом приближении, и оценка вычисленного времени релаксации τ_0 показывает, что $\tau_0 \sim 10^{-8} \div 10^{-9}$ сек. В деформированном кристалле эти переходы запрещены в первом приближении и время релаксации τ_1 оказывается больше τ_0 в $(\Delta_e/\hbar\omega_0)^2$ раз, за исключением случая, когда E и H направлены по главной оси (100) или (111). В этом случае релаксация связана с переходами не между спиновыми, а между деформационными уровнями. Соответствующее время релаксации содержит тогда множитель $\exp(\Delta_e/kT)$ и сильно зависит от температуры, что и наблюдалось на эксперименте.

В докладе Г. А. Б а р а н и д з е, Б. Е. Г у р г е н и ш в и л и, М. Г. П х а к а д з е, З. К. С а р а и д з е, Г. Р. Х у ц и ш в и л и и О. Д. Ч е й ш в и л и (ИФАН, Тбилиси) «К квантовой теории циклостронного резонанса в вырожденной зоне» рассматривается ЦР в валентной зоне германия, в приближении сферической симметрии гамилтониана Латтинжера. Вычислены энергетические уровни и средние значения проекции спинового момента S_z на направление магнитного поля для каждого уровня. Уровни составляют четыре группы a^+ , b^+ (для легких дырок) и a^- , b^- (для тяжелых дырок). Обычный ЦР связан с переходами внутри каждой группы. В дополнение

к переходам $a^+ \rightarrow a^-$ и $b^+ \rightarrow b^-$, найденным Гудменом в случае, когда переменное электрическое поле $E \perp H$, авторы указали на возможность переходов $a^\pm \rightarrow b^\pm$ и $a^\pm \rightarrow b^\mp$ в случае $E \parallel H$, которые возможны даже при $k_z = 0$. Для низких уровней вероятности дополнительных переходов того же порядка, что и основных переходов $a^\pm \rightarrow a^\pm$ и $b^\pm \rightarrow b^\pm$. При последних переходах S_z меняется, поэтому эти переходы представляют в действительности не ЦР, а КР. При обсуждении Г. Е. Пикус отметил, что продольный резонанс сильно уширяется из-за k_z -размытия.

Работа Э. И. Раппа и В. И. Шека (ИП, Киев) «Комбинированный резонанс на локальных центрах большого радиуса» посвящена рассмотрению КР в кристаллах без центра инверсии. Резонанс на центрах большого радиуса естественно ожидать, ибо он предсказан для зонных носителей, а состояние в таком центре есть пакет зонных состояний. Эффективный матричный элемент поглощения оценивается как $\langle x \rangle \sim (\delta/E)(\beta H/E)R_0$, где R_0 есть радиус состояния. Отношение δ/E есть отношение спин-орбитального расщепления $\delta(k)$ при $\delta \sim R^{-1/2}$ к энергии ионизации центра; оно появляется в силу того, что КР вызван спин-орбитальным взаимодействием. Второе отношение появляется в силу того, что энергия в магнитном поле βH смешивает компоненты крамерсова дублета и открывает между ними переход. Эта оценка относится к случаю орбитального состояния $1s$ и спинового $s = 1/2$. При $s = 3/2$ возможны переходы $+3/2 \leftrightarrow -1/2$ и $-3/2 \leftrightarrow +1/2$ без малого множителя $\beta H/E$. Поэтому для усиления КР следует выбирать вещества с сильным спин-орбитальным взаимодействием и большими спинами центров.

3. ФОТОПРОВОДИМОСТЬ

Из трех работ этого направления, доложенных на совещании, две носили методический характер и ставили своей задачей получение формул для нестационарной фотопроводимости, позволяющих из сравнения с опытом определить ряд параметров полупроводника. В работе Э. И. Адировича и Е. М. Кузнецовой (ФТИ, Ташкент) «Влияние локальных уровней на релаксационные процессы в однородных полупроводниках и p - n -переходах» была решена общая задача нахождения изменения во времени концентраций свободных и захваченных на различных центрах электронов и дырок (в линейном приближении). Время релаксации в общем случае не совпадает с рекомбинационными временами жизни. В предельных случаях получаются формулы Гуро и Шокли—Рида. В работе И. А. Мирцхулава, Р. И. Чиковани и А. Л. Школьник (ТГУ, Тбилиси) «Исследование параметров локальных центров изучением кинетики индуцированной фотопроводимости» исследовалось изменение во времени фототока при высвобождении электронов с локальных уровней светом соответствующей частоты и перемещение их на другие уровни. Теория предсказывает прохождение фототока через максимум и падение до нуля или стационарного значения. Сравнение теории с опытом проводилось для монокристаллов CdS , для которых были оценены некоторые параметры локальных центров.

Наибольший интерес вызвала работа М. И. Каганова и И. М. Лифшица (ФТИ, Харьков) «О беспороговом фотоэффекте в металлах типа графита», в которой была изучена частотная зависимость коэффициента поглощения света и фотопроводимости в веществах, в которых имеются самопересекающиеся в особой точке энергетические поверхности, например два конуса с общей вершиной или две соприкасающиеся поверхности. Был рассмотрен предельный случай $\omega \gg 1$, где τ — время релаксации электронного газа, ограничивающий частоты снизу. Проводимость при самых низких частотах пропорциональна ω^3 , а при больших — ω^2 и не обладает существенной температурной зависимостью. Рассмотрено также пороговое поглощение. В зависимости от положения особой точки p_0 относительно поверхности Ферми получается зависимость $\sigma \sim (\omega - \omega_0)^{3/2}$ и $\sigma \sim (\omega - \omega_0)$, где ω_0 — пороговая частота.

4. ТЕОРИЯ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ

Две работы этого направления были посвящены вопросам люминесценции и фотопроводимости, стимулированной полем. В первом случае безызлучательный переход из возбужденного состояния в основное уменьшает выход люминесценции. Однако абсолютная величина вероятности перехода оказывается на много порядков больше рассчитанной теоретически. В. А. Коварский и Э. П. Синявский (ИФМ, Кишинев) в работе «Резонансный эффект в теории безызлучательных переходов» показали, что согласие существенно улучшается, если учесть, что у точки сближения кривых адиабатических потенциалов электронные волновые функции существенно отличаются от соответствующих минимумам потенциалов. Для фотопроводимости в сильных полях, как показали Ю. Е. Перлин и А. Г. Чебан (КГУ, Кишинев) в работе «К теории распада локальных состояний в электрическом поле», существенную роль играет туннельный эффект из возбужденного состояния локального центра в свободное. При расчете принималось во внимание изменение потенциальной энергии

электрона в поле дефекта за счет инерционной поляризации решетки. При сравнительно небольших полях освобождающийся электрон переходит в поляронное состояние, а при больших — в зонное. Сравнение с опытом указывает на существенную роль термоионизации даже при низких температурах, поскольку энергия ионизации из возбужденного состояния невелика и еще снижена полем. В дискуссии Л. Э. Гуревич и Л. В. Келдыш отметили недостаточную ясность представления об автоионизации полярона, поскольку наличие внешнего поля не может уничтожить взаимодействия электрона с инерционной поляризацией.

5. КИНЕТИКА МАЛОЙ ПОДВИЖНОСТИ

Большой интерес вызвали доклады по кинетической теории полупроводников с малой подвижностью. Наиболее обстоятельными в этом направлении были работы М. И. Клингера (ИПАН, Ленинград) «Теория явлений переноса в полупроводниках с малой подвижностью» и И. Г. Лаяг, Ю. А. Фирсова (ИПАН, Ленинград) и Л. А. Эфроса (ФТИ, Ленинград) «Кинетическая теория полупроводников с малой подвижностью».

В работе Ланг, Фирсова и Эфроса для рассмотрения кинетических эффектов разработана методика расщипки общей формулы Кубо в случае сильной связи электронов с поляризационными колебаниями решетки. В области низких температур (ниже дебаевской) проводимость носит обычный характер, причем носителями являются нелокализованные поляроны малого радиуса. В области температур выше дебаевской механизм движения носителей существенно связан с многофононными процессами, даже после перенормировки и выделения полярона. Его можно описать следующим образом. Электрон локализован на узле решетки в виде полярона и проводит в таком состоянии время Δt , после чего переходит на другой узел. Этот переход не является туннельным просачиванием под барьером, ибо время такого процесса $t_p \gg \Delta t$. Переход происходит путем классического надбарьерного переброса за время $t_0 \ll \Delta t$. Таким образом, мы имеем редкие и быстрые перебросы носителей с узла на узел; вопрос о том, в какой форме носитель движется, зависит от сравнения t_0 и Δt с временем установления поляризации решетки $1/\omega_0$, где ω_0 — частота продольных поляризационных фононов. Так как, с одной стороны, $t_0 \ll 1/\omega_0$, то за время перехода электрона поляризация не успевает следовать за ним, и, перейдя на новый узел, электрон оставляет поляризацию, соответствующую старому узлу. Но, с другой стороны, $\Delta t \gg 1/\omega_0$, поэтому, пока электрон будет пребывать на новом узле, поляризация перестроится соответственно новому положению электрона. При таком механизме температурная зависимость подвижности имеет экспоненциально активированный характер $\mu \sim e^{-E_a/kT}$, причем энергия активации E_a меньше энергии связи полярона E_p ; поэтому эта зависимость не связана с диссоциацией поляронов и увеличением числа свободных носителей в зоне проводимости.

В работе Клингера построена теория кинетических коэффициентов, основанная на общих выражениях Кубо и методике резольвент Ван-Хове. Носителем является полярон малого радиуса, возникший в результате сильного электрон-фононного взаимодействия. При низких температурах $T < T_0$ (T_0 — порядка дебаевской температуры) носитель поляронного типа описывается зонным состоянием и перенос определяется рассеянием между такими зонными состояниями. При высоких температурах $T > T_0$ имеет место другой механизм переноса, обусловленный переходами локализованного полярона между ячейками. Критерием, определяющим этот механизм, является отношение $\eta = \Delta/\Gamma$ двух энергетических величин, характеризующих локализованное состояние полярона. Здесь Δ — ширина поляронной зоны, иначе, $1/\Delta$ есть время распыливания локализованного пакета при заданных числах фононов; Γ — ширина уровня такого состояния, т. е., иначе, $1/\Gamma$ есть время жизни по отношению к переходу локализованного состояния в соседнюю ячейку вместе с перераспределением фононов. При $T > T_0$ имеет место $\Delta \ll \Gamma$ и локализованный пакет осуществляет несколько переходов между ячейками, прежде чем распыливается. При этом нечетные по магнитному полю эффекты типа эффекта Холла определяются фазово-коррелированной частью таких переходов. В этом смысле процесс переноса не сводится полностью к обыкновенной диффузии, где фазовая корреляция отсутствует. С понижением температуры отношение η возрастает, возрастает и «волновая» доля процесса по сравнению с «диффузионной». При $T < T_0$ имеем $\Delta \gg \Gamma$ и в низшем по Γ/Δ приближении получается обычное кинетическое уравнение. Другим критерием теории является $\xi = \Gamma/\omega_p \ll 1$, где ω_p — характерная частота фононов. Он означает, что за время жизни локализованного носителя успевает установиться равновесная деформация решетки, соответствующая данной локализации носителя. При $T > T_0$ теория дает активационный характер температурной зависимости для дрейфовой и холловской подвижностей; энергии активации, вообще говоря, разные, но одного порядка.

В дискуссии по этим докладам было отмечено, что хотя работы базируются на близких физических идеях и окончательно их выводы тоже весьма близки, но в дета-

лях температурных зависимостей и в критериях теории имеются различия, причины которых остаются не очень ясными. К проблеме малой подвижности относилась и работа Э. Л. Нагаева (Инт-т источников тока, Москва) «Энергетический спектр и подвижность поляронов малого радиуса», в которой выведено кинетическое уравнение для полярона. Оно решено в том случае, когда рассеивающий потенциал зависит только от электронных координат. Это дает при высоких температурах экспоненциально возрастающую с температурой подвижность, с энергией активации порядка энергии образования полярона.

6. ГАЛЬВАНО- И ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

Большой интерес вызвала работа М. Я. Азбеля (ФТИ, Харьков) «Теория гальваномагнитных явлений в полупроводниках ограниченных размеров», в которой была предсказана сложная зависимость удельного сопротивления проводника достаточной малой толщины от направления и величины магнитного поля. Докладчик подчеркнул принципиальное отличие роли рассеяния для проводимости в отсутствие и при наличии магнитного поля. В последнем случае для бесконечной длины свободного пробега l имеем $\sigma = 0$. В сильном магнитном поле $\sigma(H) = \sigma(0)(r/l)^2 \sim r^2/l$, где r — радиус орбиты. Если главную роль играет рассеяние на поверхности, то $\sigma(H) \sim \sigma(0)(r/l)$, так как момент столкновения с поверхностью при данном начальном состоянии движения электрона однозначно определен, а путь, проходимый перпендикулярно к магнитному полю, составляет величину r вместо l . В результате общая проводимость образца при наличии объемного и поверхностного рассеяния пропорциональна $\sigma(0)[(r/l)(l/d) + (r/l)^2]$, а при небольшой толщине образца d , когда $d \ll l^2/r$, ток течет главным образом вблизи поверхности. При наклонном магнитном поле плотность тока испытывает резкие колебания с расстоянием от поверхности и даже меняет знак. Теория позволяет оценить из сравнения с опытом величины r , l и форму поверхности Ферми.

В работе А. И. Ансельма (ИПАН, Ленинград) и Б. М. Аскерова (ФИАН, Баку) «Продольные термомагнитные эффекты в сильном магнитном поле» рассмотрены эффекты изменения термо-э. д. с. и электронной части теплопроводности в квантующем магнитном поле, параллельном электрическому полю или градиенту температуры для полупроводника с простой зонной структурой. Известно, что для таких полупроводников в квазиклассическом приближении, когда применяется кинетическое уравнение и считается, что релаксация и химический потенциал не зависят от магнитного поля, эти эффекты равны нулю. Так как магнитное поле не влияет на движение электрона вдоль него, то метод кинетического уравнения можно сохранить, но от последних допущений относительно релаксации и химического потенциала следует отказаться. При вычислении термо-э. д. с. рассмотрено рассеяние на акустических фононах и ионизованных примесях. На акустических фононах в квантовом пределе $\tau \sim \epsilon_2^{1/2}$, тогда как без поля $\tau \sim \epsilon_1^{1/2}$. На примесях $\tau \sim \epsilon_2^{3/2}$ (так же как и без поля). Вычисления показывают, что изменение термо-э. д. с. в магнитном поле составляет заметную долю термо-э. д. с. без поля.

Теории гальваномагнитных явлений в приближении времени релаксации была также посвящена работа Р. Г. Арипова, В. В. Кечина, А. И. Лихтер и Ю. А. Поспелова (ИФВД, Москва) «Влияние давления на электронный спектр графита», где рассматривалась модель Слончевского и Вейса. Так как носители занимают узкую область вблизи ребер зоны Бриллюэна, то время релаксации считалось зависящим только от компоненты импульса вдоль ребра. Эта зависимость найдена из эксперимента при атмосферном давлении. Кроме того, составлены такие комбинации выражений для гальваномагнитных эффектов, которые не зависят от времени релаксации, а зависят только от параметров электронного спектра. Экспериментальное исследование при разных давлениях дает возможность восстановить зависимость электронных параметров от давления.

В интересной работе Ю. Н. Образцова (ИПАН, Ленинград) «К теории термомагнитных эффектов в квантующих магнитных полях» рассматривается вопрос об определении потоков в феноменологической теории. Показано, что для правильного определения микроскопических потоков заряда и энергии надо учесть поверхностные токи, эквивалентные намагниченности. Это приводит к добавлению в известные выражения членов с ротором намагниченности.

В работе Е. П. Покатилова (КГУ, Кишинев) «Магнитосопротивление в полупроводниках с петлей экстремумов» путем решения кинетического уравнения выводятся выражения для тока в случаях сильного вырождения и отсутствия вырождения электронов полупроводника, у которого минимумы энергии в зоне располагаются на замкнутой кривой (так называемой «петле экстремумов»). Выводятся и анализируются формулы для магнитосопротивления.

Несколько в стороне от этого круга работ стоит работа Ю. П. Ирхина и Ш. Ш. Абельского (ИФМ, Свердловск) «К теории спонтанного холл-эффекта

в ферромагнитных полупроводниках». В этой работе методом матрицы плотности получено кинетическое уравнение при учете рассеяния электронов на фононах до второго порядка. В отличие от случая примесей, при рассеянии на фононах отсутствуют поправки к скорости электронов, вызванные изменением потенциала рассеяния под влиянием спин-орбитального взаимодействия. Поэтому только полевой член кинетического уравнения во втором приближении содержит член, линейный по спин-орбитальному взаимодействию. Это приводит к зависимости для спонтанного холл-коэффициента $R_s \sim \rho^2$ (ρ — электросопротивление).

В работе Е. А. Турова и В. Г. Шаврова (ИФМ, Свердловск) «К феноменологической теории гальваномагнитных эффектов в антиферромагнитных полупроводниках» проведено рассмотрение гальваномагнитных явлений в антиферромагнитных кристаллах с различной магнитной и кристаллографической симметрией. Тензор сопротивления $\rho_{\alpha\beta}$ рассматривается как функция магнитного поля H , суммарного поля под решеток $M = M_1 + M_2$ и направления антиферромагнитного упорядочения $L = M_1 - M_2$. Характер разложения $\rho_{\alpha\beta}$ в ряд по H , M и L определяется симметрией и определяет характер возможных эффектов. Наличие антиферромагнитной структуры приводит к наличию ряда специфических эффектов.

7. НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ И ГЕНЕРАЦИЯ

В ряде работ рассматривалось поведение электронов полупроводника в сильных электрических полях. В этих случаях проявляются эффекты нелинейности и зачастую возникают такие ситуации, когда система оказывается в неустойчивом состоянии и может генерировать.

Одной из типичных работ такого рода является работа В. Л. Гуревича (ИПАН, Ленинград) «Лавинное рождение оптических фононов в полупроводниках». В диэлектриках затухание γ_L оптических фононов (экситонов) связано с ангармонизмом и дефектами. В полупроводниках появляется дополнительное затухание γ_e , связанное взаимодействием с электронами проводимости, поэтому полное затухание $\gamma = \gamma_L + \gamma_e$. В сильном электрическом поле γ_e может оказаться отрицательным, т. е. электроны, забирая энергию от поля, передают ее решетке. Это имеет место, если фазовая скорость фононов меньше, чем дрейфовая скорость электронов. Если, кроме того, окажется, что $|\gamma_e| > \gamma_L$, то будет иметь место лавинная генерация оптических фононов. Такая генерация должна привести к возникновению инфракрасного излучения в узком частотном диапазоне вблизи предельной фононной частоты, хотя выход такого излучения из кристалла, вероятно, будет затруднен. Отвечая на вопрос Мойжеса, докладчик указал, что, хотя акустические фононы генерируются раньше оптических, генерацию последних можно наблюдать. Для этого надо быстро увеличивать электрическое поле, чтобы к моменту генерации оптических фононов акустические еще не успели размножиться. Отвечая на вопрос Ш. М. Когана, докладчик отметил, что в его теории генерируются не колебания, обусловленные размерами образца, а колебания, которые стабилизируются нелинейностью.

В работе Л. Э. Гуревича и И. В. Иоффе (ФТИ, Ленинград) «Теория неустойчивости тока в полупроводниках» была предложена теория самовозбуждения колебаний в полупроводнике, к которому приложены почти параллельные электрическое и магнитное поля. Она основана на использовании выражения для тока при наличии полей и градиента концентрации, уравнений непрерывности и Пуассона. После линеаризации этих уравнений относительно отклонений поля $E(x, t)$ и концентрации $n(x, t)$ от стационарных $E(x)$ и $n(x)$ получаются два решения, одно из которых, соответствующее низкой частоте колебаний, обладает растущей во времени амплитудой. Качественно этот эффект связан с тем, что при флуктуации концентрации диффузия стремится уменьшить ее градиент, а холловское поле — увеличить. Доклад вызвал много вопросов относительно критериев неустойчивости, конкретных зависимостей, а также качественного объяснения явления. М. Я. Азбель отметил существенную роль рассеяния на поверхности, которое должно учитываться в случае больших магнитных полей.

В работе Р. Ф. Казаринова и В. Г. Скобова (ФТИ, Ленинград) «К теории нелинейных гальваномагнитных явлений в полупроводниках» изучается электропроводность ионных полупроводников в сильных скрещенных электрическом и магнитном полях. При низких температурах релаксация импульса электронов обусловлена рассеянием на ионизованных примесях, а релаксация энергии — пьезоэлектрическими фононами или слабой дисперсией оптических. При малом токе I справедлив закон Ома в зависимости E_j (проекция E на j) от I , а сопротивление пропорционально частоте соударений с примесями ν_i . При больших I происходит разогрев электронного газа и ν_i уменьшается, что приводит к уменьшению магнетосопротивления с ростом I . В этой области имеется падающий участок вольт-амперной характеристики. При еще больших I электроны разогреваются настолько, что ν_i становится меньше, чем частота столкновений с оптическими фононами ν_0 . Поскольку ν_0 не зависит от энергии элект-

ронов, то магнетосопротивление перестает зависеть от j и вновь выполняется закон Ома, но с сопротивлением, пропорциональным v_0 , а не v_i .

При рассмотрении близких вопросов в работе Ш. М. К о г а н а (ИРЭ, Москва) «К теории горячих электронов» используется полуфеноменологический подход, основанный на понятии электронной температуры T , большей температуры решетки T_0 . Вычисляется мощность $p(T)$, передаваемая электронами решетке, которая выражается через корреляционную функцию электронной плотности в различных токах пространства и времени. Вычисления проводятся для акустического и пьезоакустического взаимодействия для сильного магнитного поля и без него. Температурные характеристики передаваемой мощности $p(T)$ и проводимости $\sigma(T)$ используются для построения вольт-амперных характеристик полупроводника. Интересным является случай невырожденного электронного газа, когда $\sigma \sim T^{3/2}$, а рассеяние происходит на пьезопотенциале. Тогда при высоких электронных температурах $p \sim T^{1/2}$, что при $T > 2T_0$ приводит к отрицательной дифференциальной проводимости σ_d . При очень больших T вступают в игру другие механизмы рассеяния (деформационный потенциал, оптические фононы), что снова дает $\sigma_d > 0$. В результате вольт-амперная характеристика имеет S-образную форму.

В работе В. А. Ч у е н к о в а и Ч э н ь-К е-м и н (ФИАН, Москва) «О протекании пробоя во времени» было проведено обобщение теории одного из авторов на нестационарный случай. Рассматривалась как ударная, так и термическая ионизация примесных центров на основании решения кинетического уравнения для электронов в сильном электрическом и магнитном поле. Началом пробоя считалось состояние, когда число ионизаций превышает число рекомбинаций. Была установлена зависимость критического поля E_c от температуры, имеющая вид кривой с максимумом при некоторой температуре T_c . При $T < T_c$ доминирует электрический пробой, а при $T > T_c$ происходит смешанный термоэлектрический пробой. При сильных магнитных полях, когда $\omega \tau \gg 1$ (ω — частота Лармора, τ — время свободного пробега), E_c растет линейно с H . Изучен процесс протекания теплового пробоя во времени в случае прямоугольных импульсов, длительность которых много больше или много меньше времени распространения тепла в полупроводнике. В дискуссии Ю. Е. П е р л и н отметил существенную роль эффекта Френкеля, снижающего пробойное поле. По оценке докладчика эффективное снижение барьера $\propto \sqrt{E_c}$ при пробойных полях невелико. Однако этот результат существенно зависит от предполагаемой модели примесного центра.

8. РАБОТЫ ПО ТЕРМОДИНАМИКЕ КРИСТАЛЛОВ

Три работы этого направления были посвящены тепловым и магнитным свойствам полупроводников. А. Е. М а р и н ч у к и В. А. М о с к а л е н к о (ИФМ, Кишинев) в докладе «К термодинамике кристаллической решетки» изложили метод расчета термодинамического потенциала кристалла при учете членов ангармонизма III и IV порядков. Он основан на применении температурной функции Грина и диаграммной техники. Авторы использовали вариационный принцип, позволяющий приближенно реализовать этот расчет.

В работе Ю. М. С е и д о в а (ФИАН, Баку) «Теория анизотропии косвенного обмена по многоэлектронной модели» была приведена приближенная диагонализация гамильтониана кристалла с учетом спин-орбитального взаимодействия по методу Боголюбова — Тябликова. В качестве параметра разложения ϵ использовалось отношение перекрытия ψ -функций магнитных ионов к перекрытию немагнитных. Результаты прилагались к антиферромагнитному кристаллу $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Энергетический спектр кристалла имеет щель и содержит четыре ветви, аналогичные акустическим и оптическим колебаниям, соответственно различным ориентациям спинов.

В работе К. Б. В л а с о в а и А. И. М и ц е к а (ИФМ, Свердловск) «К термодинамической теории веществ, в которых возможно сосуществование ферро- и антиферромагнетизма» был исследован механизм однонаправленной (обменной) анизотропии и получены условия, при которых она может проявляться. Было обсуждено поведение ферро- и антиферромагнетиков в случаях, когда однонаправленная анизотропия отсутствует.

Коллективным свойствам экситонного газа была посвящена работа В. А. М о с к а л е н к о и А. Н. Б о б р ы ш е в о й (ИФМ, Кишинев) «Энергетический спектр и термогидродинамика экситонов». Если концентрация экситонов очень велика, то решающую роль в поведении экситонов играет их взаимодействие друг с другом. При достижении температуры бозе-конденсации происходит фазовый переход второго рода, причем скачок теплоемкости имеет порядок самой ее величины. Элементарные возбуждения системы почти полностью сконденсированных экситонов и фононов обладают сложным энергетическим спектром $E(k)$; имеются «звуко-экситоны», для которых при малых импульсах $E(k) \sim k$. Приведены критерии применимости теории, накладывающие ограничения на концентрации и характер взаимодействия экситонов.

В работе З. И. У р и ц к о г о (Казань) рассмотрен новый механизм рассеяния фононов в диэлектриках через образование виртуальной электронно-дырочной пары, которая аннигилирует с последовательным образованием двух фононов. При низких температурах такой процесс может определять теплопроводность в диэлектриках, приводя к другой температурной зависимости, нежели процесс, связанный с ангармонизмом. Оценки сделаны на акустических фононах. Отмечены некоторые особенности взаимодействия с электронно-дырочным вакуумом по сравнению с электронно-позитронным в квантовой электродинамике (невыполнение теоремы Фарри).

В резолюции совещания после констатирующей части отмечается:

«...Совещание считает целесообразным продолжать и развивать работу в следующих направлениях:

1. Теория кинетических процессов и исследование явлений неустойчивости в полупроводниках.

2. Изучение структуры энергетических зон в кристаллах.

3. Исследование свойств неидеальных кристаллов.

4. Исследование поведения «горячих» электронов в полупроводниках.

5. Развитие теории рекомбинации носителей тока в полупроводниках и теории безызлучательных переходов.

6. Теория явлений резонанса в полупроводниках.

7. Исследование радиационных эффектов в твердых телах.

8. Исследование оптических явлений в полупроводниках.

9. Теория различных полупроводниковых приборов.

Совещание обращает внимание на отставание экспериментальных работ в области физики полупроводников. Это приводит к тому, что многие теоретические идеи, разработанные впервые в Советском Союзе, экспериментально осуществляются за рубежом (циклотронный резонанс в металлах, комбинированный резонанс, циклотронный резонанс в деформированных полупроводниках, не прямые переходы в туннельных диодах и др.). С другой стороны, это приводит к появлению теоретических работ, оторванных от эксперимента и не представляющих существенного методического интереса.

Несмотря на трудности, возникающие при организации Всесоюзных совещаний по теории полупроводников (обусловленные непрерывным ростом числа участников), считать желательным проведение таких совещаний с периодичностью 1 раз в два года. Собрание выражает желание, чтобы VI Всесоюзное совещание по теории полупроводников было организовано в г. Кишиневе в конце сентября 1964 г. Собрание считает, что повестка дня текущего совещания была чрезмерно перегружена докладами, а поэтому предлагает оргкомитету VI Всесоюзного совещания по теории полупроводников провести следующие мероприятия: 1) использовать репортерскую систему, при которой одному лицу поручается сделать сводный критический обзорный доклад по представленным работам в некоторой области; 2) существенно уменьшить число докладов на заседаниях, предоставив на каждый доклад больше времени.

Собрание считает, что наряду со Всесоюзными совещаниями по теории полупроводников необходимо более широко практиковать: 1) проблемные совещания малочисленных групп теоретиков, работающих в определенной области; 2) школы повышения квалификации для теоретиков; 3) школы повышения квалификации для экспериментаторов, с привлечением теоретиков для чтений лекций и докладов».

К. Б. Толпыго, И. Б. Левинсон