[539. 19+548. 0:53] (049. 3)

ЭЛЕКТРОНИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Силиньш Э. А. Электронные состояния органических молекулярных кристаллов.— Рига: Зинатне, 1978.— 344 с.

Издательство АН Латвийской ССР «Зинатне» издало монографию Э. А. Силиньша, посвященную вопросам электронной структуры молекулярных кристаллов. Это первая в мировой литературе монография, в которой подробно обсуждаются вопросы энергетической структуры ионизированных состояний органических молекулярных кристаллов.

Знание параметров энергетической структуры электронов и дырок в твердых телах важно, поскольку позволяет объяснить основные наблюдаемые в них физические явления. Значительные успехи в этом направлении, достигнутые для неорганических полупроводников и металлов, изложены в ряде специальных монографий. Что касается органических твердых тел, то здесь успехи пока значительно меньше. Наиболее полно изучены некоторые молекулярные кристаллы. В монографии Э. А. Силиньша для этого класса органических твердых тел рассмотрены вопросы электронной структуры ионизированных состояний.

Низкомолекулярные органические кристаллы обладают слабым межмолекулярным взаимодействием типа Ван-дер-Ваальса, и это обусловливает незначительные изменения электронной структуры молекул при образовании твердой фазы. Влияние кристаллической решетки проявляется в основном как слабое возмущение электронной структуры отдельных молекул. Это означает, что к органическим молекулярным кристаллам неприменимы представления зонной теории в одноэлектронном приближении.

Слабое взаимодействие между молекулами обусловливает сильно выраженную локализацию свободных носителей заряда на индивидуальных молекулах кристалла. Перенос носителей заряда в таких кристаллах рассматривается в модели некогерентных перескоков. При таком движении носителя заряда в кристалле существенную роль играет электронная поляризация кристалла носителем. Для описания энергетической структуры ионизированных состояний молекулярного кристалла была предложена феноменологическая модель Лайонса, в рамках которой учитывается многоэлектронный эффект электронной поляризации кристалла квазилокализованным носителем заряда.

В монографии в основе изложения энергетической структуры ионизированных состояний лежит модель Лайонса, которая существенно развита и уточнена самим автором. Энергетическая структура ионизированных состояний молекулярного кристалла определяется такими параметрами, как величина порога ионизации кристалла I_G и сродство кристалла к электрону A_G, а также параметрами многоэлектронного взаимодействия носителя заряда с молекулами окружающей решетки. Следовательно, в такой модели уровни стационарной проводимости электронов и дырок являются многоэлектронными уровнями и характеризуют энергию термализованных квазисвободных носителей заряда в кристалле.

Определение энергетической структуры ионизированных состояний сводится к экспериментальному определению указанных выше параметров. Наибольшие трудности связаны с определением величины поляризации кристалла носителем заряда. В монографии достаточно подробно изложены все методы теоретического и экспериментального определения параметров энергетической структуры ионизированных состояний для идеальных (бездефектных) молекулярных кристаллов.

Большое внимание в монографии уделено рассмотрению влияния различных дефектов решетки (точечные дефекты, дислокации) на энергетическую структуру молекулярных кристаллов. По существу, эта часть книги имеет самостоятельный интерес, поскольку в ней наиболее полно изложено современное состояние физики дефектов органических молекулярных кристаллов. Подробно обсуждается проблема влияния типов дефектов решетки на характер распределения локальных состояний по энергии, методы экспериментального определения такого распределения. Здесь автор впервые обосновывает и доказывает гауссовское распределение локальных состояний по энергии в органических полупроводниках.

В развитие большинства рассматриваемых в монографии проблем большой вклад внесли оригинальные работы автора и его сотрудников.

Наряду с решенными проблемами автор обсуждает и те нерешенные вопросы, которые существуют в этой области. К таким нерешенным проблемам можно отнести разработку новых методов экспериментального изучения электронной структуры молекулярных кристаллов, идентификацию типов дефектов решетки с характером создаваемых ими локальных центров; особенно это относится к изучению глубоких уровней в кристалле и др.

К сожалению, некоторые вопросы в монографии освещены недостаточно полно. Автор при рассмотрении энергетической структуры идеальных молекулярных кристаллов ограничился в основном рассмотрением только нафталина и антрацена. Здесь желательно было представить данные для бóльшего числа соединений, что, возможно, позволило бы шире обобщить результаты, например, показать роль величины межмолекулярного взаимодействия на параметры энергетической структуры. Кроме модели Лайонса, полезно было бы дать подход обычный, зонный, в приближении сильно связанных электронов, дать представление о зонах Бриллюэна, структуре зон электронов и дырок, значения эффективных масс электронов и дырок для молекулярных кристаллов. Можно было расширить и ту часть книги, в которой излагается энергетическая структура нейтральных состояний. Однако эти замечания имеют скорее характер пожеланий.

Появление монографии Э. А. Силиньша свидетельствует о возросшем интересе к физике молекулярных кристаллов. Несомненно, что монография будет полезна широкому кругу специалистов, занимающихся физикой и химией органических твердых тел.

М. В. Курик