

ЮБИЛЕЙНАЯ НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПОСВЯЩЕННАЯ 100-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ Я.И. ФРЕНКЕЛЯ (23 февраля 1994 г.)

23 февраля 1994 г. в Институте физических проблем им. П.Л. Капицы РАН состоялась юбилейная научная сессия Отделения общей физики и астрономии РАН, посвященная 100-летию со дня рождения Я.И. Френкеля. На сессии были заслушаны доклады:

1. А.С. Боровик-Романов. Вступительное слово.
2. Б.П. Захарченя. Открытие экситонов.
3. Р.А. Сурис. Я.И. Френкель о реальной поверхности кристаллов.
4. В.Я. Френкель. Работы Я.И. Френкеля по ядерной физике.

PACS numbers: 01.60.+q

Б.П. Захарченя. О т к р ы т и е э к с и т о н о в. Яков Ильич Френкель был выдающимся творцом моделей физических явлений в различных областях физики. Основной чертой его творчества было новаторство. В этом убедило меня, студента физического факультета Ленинградского университета, посещение нескольких его лекций, которые он читал во второй половине 40-х — начале 50-х годов в Политехническом институте. Сравнив его с моими тогдашними профессорами из ЛГУ, я остро почувствовал разницу между новатором и архаистами. Увы! Эта разница улавливалась далеко не всеми, и многие студенты были недовольны лекциями Якова Ильича.

Одной из вершин творчества Френкеля было создание им теоретической модели экситона — квазичастицы в кристалле, осуществляющей транспорт энергии, но не заряда. Сейчас экситоны экспериментально открыты в полупроводниках, молекулярных, диэлектрических и ионных кристаллах. Экситоны привлекаются для объяснения различных физических процессов (фотоэлектрические явления, образование радиационных дефектов, люминесценция и т.д.) в кристаллах и полимерах, включая биологические объекты.

В 1931 и в 1936 гг. Френкелем были опубликованы его знаменитые статьи, где впервые было введено понятие экситона, как волны электронного возбуждения в кристалле [1, 2]. В 30-х годах для описания зонных состояний в кристаллах использовалась схема Блоха, основанная на методе Хартри-Фока, где не было места электронным корреляциям. Осознавая это обстоятельство, Френкель избрал для построения теории экситонов приближение Гайтлера-Лондона. Поэтому он рассматривал в своих первых работах кристаллы благородных газов, построенные из слабо взаимодействующих атомов. Волновая функция "волны возбуждения" — экситона (так называемая трансляционная волновая функция) в написании Френкеля имела вид

$$\chi_p = \sum_k \frac{1}{n^{1/2}} e^{ipk} \Phi_k, \quad (1)$$

где p — квазиимпульс, n — число атомов в кристалле, Φ_k — многоэлектронная волновая функция экситона¹, которая в пренебрежении обменом для k -го узла, на котором локализовано возбуждение, имела вид:

$$\Phi_k = \psi_1 \psi_2 \dots \psi_k \dots \psi_n, \quad (2)$$

где ψ_i ($i = 1, 2, \dots, k-1, k+1, \dots, n$) и ψ_k — волновые функции невозбужденных и возбужденного состояния.

В работе [2] были получены правила отбора для экситонных оптических переходов, состоящие в том, что квазиимпульс экситона p равен квазиимпульсу фотона q . С точки зрения современного физика, привыкшего к закону сохранения импульса в твердом теле, такое утверждение кажется тривиальным, однако во времена создания модели экситона доказать это было непросто. Вследствие малости q возникают экситоны с импульсом, близким к нулю, т.е. у самого дна экситонной зоны. Соответствующие линии в оптическом спектре должны быть узкими. В случае возникновения при поглощении фотона независимо движущихся электрона и дырки с квазиимпульсами p_e и p_h , правило отбора имеет вид

$$p_e + p_h = q$$

и оптические спектры состоят из широких полос. Например, в полупроводниках, где коэффициент поглощения велик, в отсутствие экситонов наблюдается "скупный" край непрерывного поглощения.

Первая работа Френкеля, состоящая из двух частей, была названа им "On the transformation of light into heat in solids", поскольку основной задачей этого теоретического исследования был поиск универсального механизма безызлучательных переходов в кристаллах, возбуждаемых светом. Эта задача возникла, по-видимому, из факта существования слабого вторичного свечения у кристаллов с плохо контролируемым в то время составом и концентрацией примесей и из желания построить строгую теорию безызлучательной диссипации энергии фотонов, аналогичную той, что существовала в физике изолированного атома, где электронное возбуждение трансформируется путем неупругих соударений в кинетическую энергию частиц. Осознавая трудности, возникающие при попытке "разменять" энергию оптического фотона на фононы, Френкель начал развивать идею сильного взаимодействия экситона с фононами, исходя из предположения о том, что частоты колебаний и положения равновесия различны для осцилляторов кристаллической решетки в основном и возбужденном электронном состояниях. Эта идея, вместе с концепцией "прилипшего", или автокализованного экс-

¹ Здесь k обозначает положение экситона в пространстве, т.е. в формуле (1) — это радиус-вектор. Выбор обозначения не очень удачен, так как k используется обычно для обозначения волнового вектора.

тона, рассмотренного также Пайерлсом [3], включившимся в разработку идей диссипации энергии через экситон, послужила толчком для многих дальнейших теоретических разработок.

Мы знаем сейчас, что, овладев методами контролируемого легирования и методами уменьшения поверхностной и объемной безызлучательной рекомбинации, физики научились создавать с помощью кристаллов мощные источники излучения и преобразования света. Вследствие этого может казаться, что Френкель придумал экситон, исходя из неверной информации о слабом вторичном свечении кристаллов, имевшей место в 30-х годах. Это не так, поскольку в работах Френкеля полностью осознается значение экситонов для оптической спектроскопии кристаллов. Экситонные зоны, по Френкелю, располагаются в запрещенной зоне, отделяющей основное состояние кристалла от непрерывного спектра, а оптические переходы, подчиняющиеся указанному выше правилу отбора, должны приводить к появлению узких линий в спектрах кристаллов.

Следует упомянуть, что Френкелем были получены также правила отбора для однофононных процессов, так что картина оптического спектра кристаллов по Френкелю — узкие линии и их фоннные спутники — является наиболее универсальной и в настоящее время.

Выше упоминалось, что Яков Ильич в своей теории критиковал схему Блоха, в которой, по его мнению, не было места экситонным состояниям [2, 4]. Однако существует случай, когда блоховская зонная схема может быть дополнена экситонными состояниями. Соответствующую модель предложили Ванье [5] и Мотт [6]. Экситон Ванье–Мотта напоминает атом водорода или, скорее, позитроний. Он образован электроном с эффективной массой m_e и дыркой с массой m_h , связанными кулоновским взаимодействием в среде с диэлектрической постоянной ϵ . Энергия связи такой квазичастицы есть

$$E_n = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2 n^2}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (3)$$

где

$$\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$$

— приведенная эффективная масса экситона. Радиус экситона

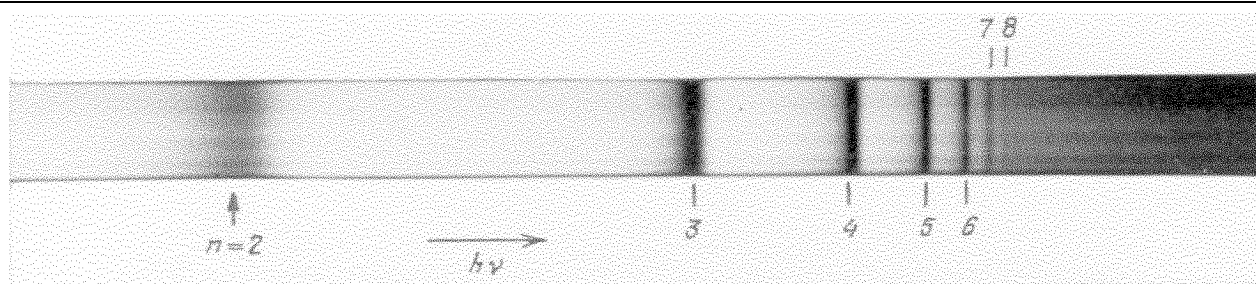
$$a_{ex} = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu e^2}. \quad (4)$$

Формула (3) справедлива, если $a_{ex} \gg a$ — постоянной кристаллической решетки. Это неравенство наилучшим

образом выполняется в полупроводниках, и экситоны в этих кристаллах обычно называют экситонами большого радиуса. Однако это лишь терминологический жаргон, а не попытка принципиально отделить экситон Френкеля, где возбуждение считается локализованным в пределах элементарной ячейки, от экситона Ванье–Мотта.

Водородоподобный спектр, состоящий из узких линий поглощения и достаточно хорошо описываемый формулой (3), был впервые обнаружен Е.Ф. Гроссом в Физико-техническом институте АН СССР в 1951 г. [7, 8] в кристалле закиси меди (см. рисунок). Благодаря удачному сочетанию параметров этого полупроводника, в спектрах совершенных кристаллических пластинок удалось наблюдать при 4,2 К до 11 членов серии! Яков Ильич знал от Гросса об этом выдающемся эксперименте, но не успел зайти в его лабораторию и полюбоваться спектром своей квазичастицы. Он плохо себя чувствовал; в январе 1952 г. его не стало.

Наблюдение узких линий в спектрах полупроводников было полной неожиданностью, так как ранее ничего подобного для этого класса кристаллов не наблюдалось. Вместе с тем, еще до теоретических работ Френкеля, узкие линии наблюдались в кристаллах солей редкоземельных элементов Жаном Беккерелем [9] и в молекулярных кристаллах — И.В. Обреимовым [10]. Более широкие полосы, представляющие структуру края фундаментального поглощения, наблюдались в щелочно-галоидных кристаллах Хильшем и Полем [11]. Значительно позже, по истечении заметного времени после работ Френкеля, на узких линиях в кристаллах двух первых типов было обнаружено так называемое давидовское расщепление [12], указывающее на их экситонную природу. Экситонное происхождение полос в щелочно-галоидных кристаллах было установлено красивыми экспериментами Апкера и Тафта [13]. Все эти эксперименты, включая и эксперимент Гросса, относятся примерно к одному времени. Однако экситон, экспериментально открытый Гроссом, стал наиболее популярным вследствие колоссального интереса к полупроводникам как к объекту, широко используемому в электронике, электротехнике и энергетике. Успехи в теоретическом и экспериментальном исследовании экситонных эффектов в полупроводниках затмили успехи в изучении экситонов в диэлектриках и молекулярных кристаллах. Надо также заметить, что экспериментаторы, наблюдавшие давидовское расщепление в молекулярных кристаллах [14], прямо не идентифицировали соответствующие линии как экситонные, приписывая их гипотетическим "кристаллическим состояниям". Это обстоятельство принято деликатно обходить, но "я с детства не любил овал, я с детства угол рисовал". Гросс же твердо верил в экситонную



Оптический спектр экситона в закиси меди; желто-оранжевая область видимого спектра

природу открытой им водородоподобной серии линий, он точно интерпретировал эксперимент уже в первой своей статье, а вторую назвал "Оптический спектр экситона" [7]. Об открытии экситона в полупроводниках и борьбе Гросса за экситонную интерпретацию эксперимента подробно написано в [8]. Здесь же скажу, что основным аргументом Гросса в пользу экситонной идентификации линий была их узость — аргумент, следовавший из теории Френкеля. Это не воспринималось многочисленными оппонентами, так как в начале 50-х годов плохо понимали, что оптические переходы зона — примесь не дают, как правило, узких линий вследствие размазывания волновых функций примеси в пространстве импульсов. Вскоре многочисленными экспериментами была доказана экситонная природа узких линий у края сплошного поглощения в полупроводниках.

В самом начале экситонных исследований, отвечая критикам Гросса на одной из научных сессий Отделения физико-математических наук, Абрам Федорович Иоффе сказал, что, если обнаруженные Гроссом и сотрудниками серии линий даже не принадлежат экситону, эти эксперименты знаменуют собой начало новой области исследований — оптики и спектроскопии полупроводников.

Действительно, экспериментальные и теоретические исследования экситонов в полупроводниках в 50-х и 60-х годах, если пользоваться терминологией Геге и Шиллера, были Sturm und Drang Period (периодом бури и натиска) в спектроскопии полупроводников. Гросс со своими сотрудниками в Ленинграде, теоретики из Киева, американские ученые Хонфилд и Томас за короткое время обнаружили ряд необычных свойств экситонов в электрических и магнитных полях, наблюдали эффекты пространственной дисперсии в экситонных спектрах, предсказали и открыли экситонный поляритон, экситонно-примесные комплексы, установили роль экситонов в формировании спектров люминесценции и фотопроводимости.

Попытки получить конденсат бозе-частиц — экситонов привели к исследованиям процессов в полупроводниках в условиях интенсивного лазерного возбуждения. В связи с этим возникла интереснейшая физическая проблема электронно-дырочной жидкости в кристаллах. В условиях относительно сильного возбуждения непрямозонных полупроводников удалось наблюдать многоэкситонные комплексы, строение которых удивительно напоминает атомы с оболочками, заполняющимися электронами и дырками. Атомоподобность экситонов в полупроводниках привела к мысли о возможности наблюдения в этом классе кристаллов таких явлений, как оптическая ориентация, эффект Ханле, интерференция квантовых состояний, антипересечение уровней, обычно наблюдаемых в изолированных атомах. Все эти явления с успехом наблюдались в полупроводниках, обнаружив новые специфические для кристалла особенности.

Наконец, экситонные состояния сыграли огромную роль в спектроскопии квантоворазмерных структур, полученных современными технологическими методами. В этих структурах энергия связи и сила осциллятора для экситона увеличиваются настолько, что его можно наблюдать в спектре при комнатной температуре.

Яков Ильич Френкель не только теоретически открыл экситон, он дал своему детищу имя, образовав его от греческого *exitos* — возбуждаю. Наверное, он не думал,

что это дитя вырастет в гиганта. Когда работа Френкеля докладывалась на семинаре у Паули, последний оценил ее как falsch, поскольку часто использовал при оценке чужих работ простое резюме: "Das ist entweder falsch oder trivial" (это либо неверно, либо тривиально). Яков Ильич был доволен такой оценкой, было бы обиднее второе [15]. Поистине, "нам не дано предугадать..."

Список литературы

1. Frenkel J. *Phys. Rev.* **137**, 17, 1276 (1931); перевод: Френкель Я.И. *Собрание избранных трудов*. (М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1958), т. 2, с. 126—175.
2. Френкель Я.И. *ЖЭТФ* **6** (6), 647—665 (1936).
3. Peierls R. *Ann. d. Phys.* **13**, 59 (1932).
4. Рашба Э.И. *УФН* **144** (2), 347 (1984).
5. Wannier G.H. *Phys. Rev.* **52**, 191 (1937).
6. Mott N. *Trans. Farad. Soc.* **34**, 500 (1938).
7. Гросс Е.Ф. *Избранные труды. Исследования по оптике и спектроскопии кристаллов и жидкостей* (Л.: Наука, 1976), с. 173, 178.
8. Захарченя Б.П. *ФТП* **18** (11), 1940 (1984).
9. Becquerel J. *Phys. Zs.* **8**, 929 (1907).
10. Obreimov I.W., de Haas W.J. *Proc. Amst. Acad.* **32**, 1324 (1929).
11. Hilsch R., Pohl R.W. *Zs. Phys.* **57** (3/4), 145 (1929).
12. Давыдов А.С. *Теория поглощения света в молекулярных кристаллах* (Киев, 1951).
13. Apker L., Taft E. *Phys. Rev.* **79**, 964 (1950); **81**, 698, **82**, 814 (1951).
14. Броуде В.Л., Медведев В.С., Прихотько А.Ф. *ЖЭТФ* **21** (7), 665 (1951).
15. Френкель В.Я. *Яков Ильич Френкель* (М.; Л.: Наука, 1966).

PACS numbers: 01.60 + q.

Р.А. Сурис. Я. И. Френкель о реальной поверхности кристаллов. На протяжении всей своей научной жизни Я.И. Френкель интенсивно занимался молекулярной физикой. Я думаю, что этот круг проблем привлекал его своей сложностью и открывающимися возможностями для почти художественного творчества — постановка и решение задач требовали создания объемных и красочных образов.

Здесь не место давать обзор всего творческого наследия Я.И. Френкеля в этой области. Да я и не думаю, чтобы кто-нибудь взял на себя смелость попытаться решить такую задачу. Моя цель состоит в том, чтобы напомнить об одной работе Я.И. Френкеля, в которой развита модель, играющая важнейшую роль в современной науке о кристаллах и технологии полупроводниковых наноструктур.

Речь пойдет о статье "О поверхностном ползании частиц у кристаллов и естественной шероховатости кристаллических граней", написанной в декабре 1944 г. в Казани во время эвакуации. Английская версия статьи была опубликована в 1945 г. ("*J. of Phys.*" (СССР) **9**, 392) и русский вариант — в 1946 г. (*ЖЭТФ* **16**, 39).

В этой статье Я.И. Френкель нарисовал очень яркую и в буквальном смысле этого слова объемную картину формы поверхностей, ограничивающих реальные кристаллы. Главный момент этой картины состоит в представлении кристаллических граней не как застывших поверхностей, а как непрерывно меняющихся и перестраивающихся под влиянием теплового движения объектов. По Френкелю, кристаллическая грань — это многоярусная ступенчатая поверхность, рельеф которой "дышит" в результате тепловых перемещений по ней адсорбированных атомов.