

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУКБИБЛИОГРАФИЯ

С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов. М. — Л. Гостехиздат, 1951, 256 стр., 5000 экз., 10 р. 50 к.

Настоящая монография в значительной мере подытоживает исследования С. И. Пекара и его учеников и сотрудников, относящиеся к теории полупроводников и диэлектриков с ионной кристаллической решёткой, выполненные в течение ряда последних лет. Здесь нужно прежде всего отметить, что С. И. Пекар рассматривает одноэлектронную задачу, детально изучая вопрос о поведении лишнего электрона в ионных кристаллах. Автор указывает, что в ионных кристаллах существенную роль играет взаимодействие добавочного электрона с колебаниями решётки и обязанное поляризации решётки полем самого электрона, и в этих предположениях развивает теорию электрических и оптических свойств ионных кристаллов. При этом выясняется, что учёт нового типа взаимодействия, предложенного автором, не только меняет количественно характер явлений, которые можно было бы ожидать, исходя из общеизвестной зонной модели, где обычно взаимодействие электрона с колебаниями решётки рассматривается как слабое, но в определённых случаях ведёт и к качественно отличным результатам. С этой точки зрения изучение эффектов, обусловливаемых взаимодействием электрона с колебаниями решётки, представляет значительный интерес для электронной теории ионных кристаллов и является весьма перспективным.

Теория С. И. Пекара является в известной мере дальнейшим развитием весьма важных работ Л. Д. Ландау и Я. И. Френкеля, в которых уже были сформулированы некоторые качественные черты явлений, имеющих место для электрона в решётке и нашедших своё развитие в работах С. И. Пекара. Так, в работе Л. Д. Ландау была высказана важная гипотеза о том, что электрон автолокализуется в кристалле в результате деформации окружающей решётки полем самого электрона. Я. И. Френкель указал, что электрон деформирует ближайшие к нему ионы и что эта деформация следует за ним по кристаллу.

Основная идея теории С. И. Пекара, которой и посвящено изложение всей монографии, состоит в том, что электрон поляризует окружающую его кристаллическую решётку; эта поляризация в свою очередь оказывает на него обратное воздействие, эквивалентное действию некоторой эффективной потенциальной ямы. Глубина этой ямы, как показывают расчёты С. И. Пекара, оказывается в ряде кристаллов достаточно большой (0,5—1,0 эв) для того, чтобы в ней могли существовать дискретные энергетические уровни. Локальная поляризация, вызванная электроном, связана со смещением ионов из их средних положений равновесия. Так как смещения ионов отстают от мгновенных состояний электрона, то отстаёт, следовательно, поляризация и образует для него потенциальную яму. Вследствие инерционности ионов на них действует среднее поле электрона, которое можно рассчитывать как статическое поле заряда, рас-

пределённого с плотностью $e|\psi|^2$, где ψ — волновая функция электрона в поляризационной яме. Состояния кристалла с поляризационной ямой, в которой локализован электрон, были названы автором поляронами.

Изложенные соображения носят «квазиклассический» характер. При переходе к более последовательному квантовому рассмотрению эти представления сводятся к учёту взаимодействия электрона с полем фононов, принципиально аналогичному учёту взаимодействия электрона с полем фотонов в современной квантовой электродинамике. Эта аналогия является очень глубокой и плодотворной. Она помогает понять, что то, что является объектом экспериментального исследования в ионных кристаллах есть не просто электрон как таковой, а более сложный объект (обычно называемый поляроном) — электрон плюс взаимодействующие с ним колебания решётки (фононы). Именно свойства этого объекта определяют течение так называемых «электронных» процессов в полупроводниках. Положение вещей здесь точно такое же, как в электродинамике, где мы никогда не имеем дела со «свободным» электроном, а исследуем всегда более сложный объект — электрон плюс электромагнитное поле. В электродинамике, однако, благодаря малости энергии связи электрона с полем учёт этого обстоятельства приводит в большинстве случаев лишь к малым поправкам. В кристаллах же, особенно в ионных, энергия связи электронов с полем может быть относительно весьма большой, из-за чего учёт этой связи делается существенно необходимым. Обычная зонная теория рассматривает взаимодействие электронов с фононами как слабое, благодаря чему в ряде случаев упускает из рассмотрения или неправильно передаёт важные черты явлений. Именно поэтому теория поляронов представляет существенный интерес для физики твёрдого тела.

По содержанию монография распадается на две части. В первой из них рассматривается теория поляронов (гл. II и III) и во второй — теория F - и F' -центров (гл. IV, V, VI). Во введении (гл. I) обсуждаются общие вопросы теории поляронов и даётся критический разбор зонной теории.

С. И. Пекар показывает, что энергетические уровни электрона в поляризационной яме лежат ниже дна обычной электронной зоны проводимости и что потому электроны в основном находятся в состояниях, когда им сопутствует вызванная ими самими поляризация. Показывая далее, что электрон вместе со своей поляризационной ямой может перемещаться по кристаллу, автор приходит к выводу, что в ионных кристаллах в электропроводности основную роль играют поляронные состояния, которые можно трактовать как частицы с зарядом, равным заряду электрона, и некоторой эффективной массой, которая в зависимости от параметров кристалла может значительно превосходить массу электрона. Во второй части монографии автор прилагает разработанные им методы к теории F - и F' -центров. Здесь рассчитываются энергетический спектр и поглощение света F -центрами, энергия тепловой диссоциации F -центров и некоторые их характеристики. Результаты теории находятся, как утверждает автор, в достаточно удовлетворительном согласии с экспериментальными данными.

Переходя теперь к более детальному рассмотрению отдельных результатов автора, следует прежде всего отметить, что все исследования ведутся им в приближении метода эффективной массы и при отказе от использования последнего могут претерпеть ряд существенных не только количественных, но и, что особенно важно, качественных изменений.

В главах II и III автор изучает поведение электрона в кристаллической решётке при учёте вызванной им поляризации (существенную роль этот эффект играет, повидимому, лишь для ионных кристаллов). После установления факта, что полярон может свободно перемещаться по кри-

сталлу, автор переходит к вычислению подвижностей поляронов, которое производится по обычной схеме теории возмущений в предположении, что вероятности рассеяния поляронных волн на оптических и акустических колебаниях малы. Полученные при этом результаты находятся, как говорит автор, в достаточно удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Так как при этом поляронные уровни лежат ниже зонных уровней электрона (т. е. состояний электрона, не поляризовавшего кристалл), то очевидно, что подавляющее число электронов принадлежит поляронным состояниям и потому основными носителями тока в таких кристаллах являются поляроны.

Далее следует, как нам кажется, подробнее остановиться на двух вопросах: во-первых, на вопросе о характере энергетического спектра в целом и, во-вторых, на вопросе о границах применимости теории.

Электрон в его поляризационной яме (т. е. поляроне) имеет дискретные уровни энергии; кроме того, электрон вместе со своей ямой может перемещаться по кристаллу как целое. При этом С. И. Пекар относит к собственным значениям энергии электрона собственные значения энергии электрона в поляризационной яме, а энергию поступательного движения — к энергии всей системы, поскольку полярон определяется им как состояние кристалла с поляризационной ямой, в которой локализован электрон. Нам кажется, однако, более естественным рассматривать электрон и сопровождающую его яму как единое целое, поскольку в ряде эффектов, например в электропроводности, объектом исследования является именно такое образование, и в соответствии с этим относить к энергии полярона как энергии электрона на дискретном уровне поляризационной ямы, так и энергию поступательного движения полярона как целого. Это кажется тем более целесообразным, что если использовать представления С. И. Пекара, то движение полярона по кристаллу будет представлять не что иное, как перемещение по кристаллу состояния кристалла же с поляризационной потенциальной ямой. Поскольку, однако, этот вопрос до известной степени относится к тому, что называть поляроном, мы не будем более на нём останавливаться. Так или иначе, энергия поступательного движения полярона, вычисленная автором, является непрерывной функцией квазиволнового вектора k : $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$, где M — некоторая величина, играющая роль эффективной мас-

сы полярона и зависящая от параметров решётки. Тот факт, что энергия поступательного движения полярона является квадратичной функцией его квазиимпульса, целиком обязан использованию автором приближения метода эффективной массы. Если бы автор при исследовании спектра системы не опускал периодического потенциала (с соответствующей заменой истинной массы электрона эффективной), то энергия поступательного движения полярона как целого была бы периодической функцией квазиволнового вектора, т. е. имела бы зонный характер. Именно в этом смысле можно говорить о зонах в энергетическом спектре поляронов. Поэтому имеющиеся высказывания о том, что учёт поляризации приводит к отказу от зонного спектра, являются просто неверными. Это обстоятельство представляется нам чрезвычайно существенным для экспериментаторов при интерпретации ими опытных данных, ибо оно означает, что они попрежнему могут пользоваться зонной схемой. В самом деле, параметры зонной схемы: ширины зон, расстояния между ними — определяются, как правило, не из теоретических формул, а из опыта. Ввиду этого отличие новых теоретических формул от прежних не играет для экспериментаторов при интерпретации опытных данных столь большой роли. Учёт поляризации окажется существенным при расчёте температурных эффектов, но, к сожалению, этот вопрос в исследованиях С. И. Пекара почти не затронут.

Заметим в связи с этим, что зонный вид спектра — это отнюдь ещё не зонная теория. Зонный характер спектра является следствием весьма общего свойства рассматриваемой системы — трансляционной симметрии решётки — и потому будет иметь место в любой теории, правильно учитывающей симметрию.

Вопрос о границах применимости теории С. И. Пекара имеет несколько различных аспектов. Прежде всего, при написании гамильтониана предполагалось, как указывает автор, что, с одной стороны, связанные электроны диэлектрика безинерционно следуют за движением электрона проводимости, а с другой стороны, что электрон проводимости адиабатически следует за движением ионов. Эти условия, как можно видеть, выполняются для ряда кристаллов.

Другая сторона вопроса о критериях применимости теории связана с возможностью использования приближения эффективной массы. Этот метод справедлив, если дебройлевская длина волны λ значительно превышает постоянную решётки. Здесь условия применимости выполняются хуже, так как оказывается, что λ всего в один-два раза превышает постоянную решётки (в монографии С. И. Пекар, очевидно по недоразумению, сравнивает эффективный размер полярона, примерно совпадающий с λ , не с длиной ребра элементарного куба, а с расстоянием между ближайшими ионами, которое вдвое меньше ребра куба). Это делает не столь убедительным совпадение с опытными данными, которое отмечалось в монографии.

Следует также отметить, что помимо этой количественной стороны применение метода эффективной массы встречает ещё одно ограничение, не отмеченное С. И. Пекаром. Именно, при переходе к методу эффективной массы повышается симметрия гамильтониана (например, у кубических кристаллов поле становится сферически симметричным, вместо того чтобы иметь симметрию решётки). А это приводит к ошибочному рассмотрению всех явлений, характер которых в той или иной мере обусловлен симметрией поля. Например, все возбуждённые уровни F -центра (кроме s - и p -уровней) в поле кубической решётки не имеют водородоподобного характера из-за штарковского расщепления. Это делает несколько сомнительными количественные результаты автора по расчёту F -центров. Переход к приближению эффективной массы приводит к неточностям и в других местах.

Так, легко показать, что сформулированная в монографии «теорема 1:2:3:4», из которой автор получает важное соотношение между энергиями оптической и термической диссоциаций, теряет силу при точном учёте периодического поля.

Вторая часть монографии (гл. IV, V, VI), посвящённая теории F - и F' -центров, начинается анализом экспериментальных данных. На основании этого анализа автор показывает, что наиболее естественным предположением о природе F -центров в щёлочно-галогидных кристаллах является гипотеза Де-Бура о том, что F -центр есть электрон, замещивший в решётке отрицательный ион галоида. Количественная теория F -центров на основе модели Де-Бура развивается С. И. Пекаром аналогично теории поляронов: с учётом поляризации решётки электроном, осевшим на галоидную вакансию решётки. При этом предполагается, что, во-первых, движение локализованного электрона можно рассматривать в приближении метода эффективной массы и, во-вторых, что поляризационный радиус F -центра достаточно велик, чтобы можно было диэлектрическую поляризацию решётки рассчитывать макроскопическим способом. Оба эти предположения означают, как легко видеть, что область, где волновая функция электрона, осевшего на галоидной вакансии, заметно отлична от нуля, должна быть много больше постоянной решётки. Но это условие выполняется для F -центров значительно хуже, чем для

поляронов, так как эффективный радиус электронного облака оказывается порядка постоянной решётки или меньше.

Аналогичным образом строится теория F' -центров, которые рассматриваются как пара электронов, связанная с одной галлоидной вакансией. Такая модель была выбрана в соответствии с экспериментальными данными об образовании двух F -центров при диссоциации одного F' -центра и наоборот.

На основании указанных предположений в монографии производится расчёт энергии тепловой диссоциации F -центров, ширины, формы и температурной зависимости F -полосы поглощения в ионных кристаллах, а также рассматриваются вопросы рекомбинации электронов на положительно заряженных центрах и на F -центрах, исследуется квантовый выход диссоциации F - и F' -центров и предлагается объяснение металлического типа проводимости некоторых полупроводников. Следует особо отметить хорошую тенденцию автора доводить, несмотря на математические трудности, результаты расчёта до вида, пригодного для сравнения с опытом. К сожалению, однако, сравнение количественных результатов теории с экспериментальными данными произведено без учёта ошибок, вносимых указанными выше факторами, и потому к ним нужно относиться с осторожностью.

В развиваемой С. И. Пекаром теории основными постоянными, характеризующими свойства кристаллов, и определяющими поведение электронов в этих кристаллах, являются диэлектрическая постоянная и показатель преломления, предельная частота оптических колебаний и эффективная масса электрона. Первые три из них берутся из прямых измерений, а эффективная масса, входящая во все формулы как неизвестный параметр, подбирается так, чтобы наилучшим образом удовлетворить сумме всех известных экспериментальных фактов. Сравнение теоретических данных с опытными показывает, что в определённых случаях теория даёт не только качественное, но и количественное согласие. Это говорит о том, что основные физические предпосылки, использованные в теории, более или менее правильно отражают физическую сторону явлений.

К числу недостатков монографии следует отнести и то, что она написана трудным языком, причём трудность изложения не вызвана сложностью рассматриваемых вопросов. Точно так же к недостаткам монографии надо отнести малую связь при изложении между теоретическими вопросами и экспериментальными данными, которые приведены фактически только при обсуждении окончательных результатов, что затрудняет чтение монографии.

В целом следует сказать, что монография С. И. Пекара представляет определённый интерес для лиц, занимающихся этими вопросами.

С. В. Тябликов

