

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК**ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ****ПО ПОВОДУ РЕЦЕНЗИИ С. В. ТЯБЛИКОВА НА КНИГУ С. И. ПЕКАРА
«ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕОРИИ КРИСТАЛЛОВ»**

В третьем выпуске 48 тома Вашего журнала (стр. 447) помещена рецензия С. В. Тябликова на монографию С. И. Пекара «Исследования по электронной теории кристаллов», Госгехиздат, М. — Л., 1951.

Эта рецензия нам представляется необъективной и в ряде мест просто ошибочной.

Будучи учениками С. И. Пекара, мы далеки от мысли дать достаточно объективную оценку вышеупомянутой книге, тем более, что в печати имеется подробная рецензия А. И. Ансельма, не вызывающая у нас никаких возражений («Советская книга» № 11, 1952 г.). Однако мы считаем необходимым для правильной информации читателей УФН указать на ряд фактических ошибок, допущенных в рецензии С. В. Тябликова.

1. Обсуждая вопрос об энергетическом спектре электрона в кристалле, рецензент особенно настаивает на его непрерывном и зонном характере, в противовес рассмотрению, проведённому в монографии, согласно которому можно говорить о дискретном спектре электрона в поляризационной яме.

Следует подчеркнуть, что только в адиабатическом приближении имеет вообще смысл говорить об энергетических уровнях одного электрона. В этом приближении энергия электрона (дискретная) оказывается функцией координат всех ионов. Во втором этапе адиабатического приближения (решение уравнений для колебаний ионов) полная энергия всей системы сводится к энергии ионов, причём собственная энергия электрона входит в качестве слагаемого в потенциальную энергию ионов. Эта полная энергия имеет непрерывный спектр.

Здесь вполне уместна аналогия с движущимся атомом водорода, в котором энергетический спектр электрона имеет дискретный характер, в то время как поступательное движение всей системы имеет непрерывный спектр энергии.

Наличие дискретных уровней для одного электрона должно проявиться (в отличие от прежней зонной теории твёрдого тела) в возможном поглощении света носителями тока (т. е. поляронами). Только в этом смысле (т. е. в адиабатическом приближении) и можно говорить (как это подчеркнуто в монографии) о дискретности энергетического спектра одного электрона.

Вопрос состоит не в том «... что называть поляроном...», что «более естественно рассматривать электрон и сопровождающую его яму, как одно целое», как пишет С. В. Тябликов, а в том, насколько применимо адиабатическое приближение к проблеме исследования движения электрона в кристалле и какова степень его точности. Если, как это имеет место в разобранных в монографии примерах, критерии адиабатического приближения выполнены достаточно хорошо, принятая С. И. Пекаром терминология не должна вызывать недоразумений.

2. Ошибочным является утверждение рецензента, что выражение для энергии движущегося полярона $\frac{\hbar^2 k^2}{2M}$ (k — волновой вектор) «... целиком обязано использованию автором приближённого метода эффективной массы» (в дальнейшем для краткости мы будем последний именовать МЭМ). «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, то-есть имела бы зонный характер».

В действительности С. И. Пекар рассматривал движение электронов со сравнительно малыми энергиями, лежащими у нижнего края зоны проводимости (в смысле старой зонной теории). В этом случае МЭМ оказывается достаточно точным и фактически учитывает наличие периодического потенциала. Обычно ширина разрешённой зоны полагается порядка нескольких эв, в то время как кинетическая энергия электрона в поляризационной яме достигает не более 0,2—0,4 эв, а энергия поступательного движения полярона $\frac{\hbar^2 k^2}{2M}$ составляет сотые доли эв $\left(\sim \frac{3}{2} kT\right)$.

Верхняя область спектра энергии поступательного движения полярона С. И. Пекаром вообще не исследовалась ввиду ряда специфических трудностей, появляющихся при нарушении критерия «малости» скорости полярона (указанного в монографии). Однако эти трудности не имеют ничего общего с наличием периодического потенциала, так как они возникают ещё в той области энергий полярона, когда МЭМ заведомо применим.

Вследствие этого простой ссылки на наличие периодического потенциала в кристалле ещё совершенно недостаточно для утверждения о зонном характере энергетического спектра полярона.

Нам представляется неверным следующее замечание рецензента: «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...». Оно неправильно ориентирует экспериментаторов, так как совершенно игнорирует существенное различие между прежней зонной теорией и теорией поляронов. Необходимо подчеркнуть, что поляронная теория даёт возможность предвычисления ряда величин, которые раньше можно было брать только из опыта, например, энергии тепловой и оптической диссоциации, коэффициента рекомбинации поляронов на вакансиях и F -центрах, эффективной массы носителя тока, его подвижности и так далее, при наличии всего одного параметра, берущегося из опыта.

Поэтому отличие новых теоретических формул от старых должно обязательно учитываться при интерпретации экспериментальных результатов.

3. Совершенное недоумение вызывает замечание С. В. Тябликова в конце стр. 449 о том, что учёт поляризации при расчёте температурных эффектов «... в исследованиях С. И. Пекара почти не затронут». В монографии рассмотрены следующие температурные эффекты: температурная зависимость подвижности и концентрации носителей тока, а также концентрация различных примесных центров, различие между оптической и термической энергией диссоциации F -центров, температурные зависимости коэффициента рекомбинации поляронов на вакансиях и F -центрах, температурная зависимость ширины полос примесного поглощения и

положений их максимумов, температурная зависимость проводимости полупроводника металлического типа.

Все эти многочисленные эффекты теснейшим образом связаны с явлением поляризации решётки полем электрона. Как после этого понимать выражение «Вопрос не затронут»? Может быть, рецензент имеет в виду зависимость эффективной массы носителя тока от температуры? Этот эффект в принципе, очевидно, имеет место, но, являясь поправкой более высоких приближений теории, должен мало сказываться на количественных результатах теории.

4. Совершенно ошибочно утверждение рецензента, что использование МЭМ повышает симметрию гамильтониана и «... это приводит к ошибочному рассмотрению всех явлений, характер которых в той или иной степени обусловлен симметрией поля» (стр. 450).

Если критерий применимости МЭМ выполнен*), то решения вспомогательного уравнения с эффективной массой можно строго классифицировать, как s -, p -, d -... состояния. Однако из этого вовсе не следует, что истинная волновая функция электрона обладает той же симметрией.

Поэтому кажущийся неучёт симметрии решётки не может, как полагает рецензент, сделать несколько «... сомнительными количественные результаты автора по расчёту F -центров». Причиной количественных неточностей здесь может быть только недостаточно точное выполнение критерия применимости МЭМ.

Приведённые выше соображения полностью относятся и к так называемой «теореме 1:2:3:4», которая может потерять силу при нарушении критериев применимости МЭМ и макроскопического приближения, а вовсе не при учёте периодического поля, как полагает рецензент.

5. Несколько странно выглядит замечание С. В. Тябликова в конце рецензии о «... малой связи при изложении между теоретическими вопросами и экспериментальными данными...». Можно, конечно, спорить о целесообразности вынесения сравнения теории с опытом в отдельную главу (кстати сказать, довольно объёмистую), но необходимо обратить внимание, что все доведённые до числа результаты сравнивались с экспериментами. Количество таких сопоставлений лимитировалось только недостатком опытных данных.

Эти замечания следует иметь в виду при чтении рецензии С. В. Тябликова для правильной ориентации в вопросах теории поляронов.

М. Ф. Дейген, К. Б. Толпыго