

БУЛЕТИНУЛ
АКАДЕМИЕЙ ДЕ ШТИИНЦЕ
А РСС МОЛДОВЕНЕШТЬ

ИЗВЕСТИЯ
АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР



физ. б. е.

БУЛЕТИНУЛ
АКАДЕМИЕЙ ДЕ ШТИИНЦЕ
А РСС МОЛДОВЕНЕШТЬ

ИЗВЕСТИЯ
АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР

№ 12

СЕРИЯ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ
И МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК



А. И. БОБРЫШЕВА

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЭКСИТОНОВ В ДЕФОРМИРУЕМОЙ РЕШЕТКЕ

Эксперименты, описанные в работе [1], показали, что для объяснения некоторых оптических явлений необходимо предположить поглощение одного фотона совместно парой атомов. Признаки аналогичного процесса были замечены и авторами работы [2]. Как указывают авторы [1], целый ряд особенностей во флуоресценции редкоземельных ионов может быть объяснен с такой точки зрения. Декстер [3] предположил, что за этот эффект ответственно взаимодействие между двумя соседними атомами. Поскольку в [1] изучался чистый кристалл $PrCl_3$ при температуре $4,2^\circ K$, то очевидно речь идет об одновременном возникновении двух отдельных экситонов либо одного биэкситона. Этот эксперимент показал, что энергия взаимодействия между двумя атомами очень мала, так как энергия перехода в системе из двух атомов оказалась почти равной сумме энергий переходов в двух отдельных атомах.

В работах [4, 5] предполагается возможность существования различных «подвижных» и «неподвижных» комплексов, в том числе и экситонной молекулы, и даны оценки энергий связи комплексов для предельных случаев отношения $\frac{m_h}{m_e}$ (m_h — эффективная масса дырки вблизи максимума валентной зоны; m_e — эффективная масса электрона вблизи минимума зоны проводимости).

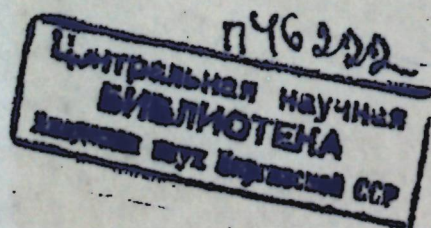
Хиллераас [6] в одноэлектронном приближении получил для энергии связи молекулы позитрония величину $0,11 \text{ ev}$. Оценка энергии связи двух экситонов Френкеля, сделанная для модели кристалла типа твердый гелий дала величины $0,013 \text{ ev}$ и $0,48 \text{ ev}$ для двух различных параметров атомных функций [7]. В связи с этим представляет интерес дальнейшее изучение взаимодействия экситонов, в частности взаимодействие экситонов в деформируемой решетке. Будем исходить из гамильтониана работы [6]:

$$H = \sum_p (\Delta + T_p) a_p^+ a_p + \sum_p B_p b_p^+ b_p + \frac{1}{2V} \sum_{pp'qq'} \nu(p-p') \delta_{kp} (p+q-p'-q') \times \\ \times a_p^+ a_q^+ a_p a_q + \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{pp'} \theta(\vec{p}-\vec{p}') a_p^+ a_{p'} (b_{p-p'} - b_{p'}^+ - b_p) \quad (1)$$

Здесь Δ — энергия образования экситона; T_p — его кинетическая энергия; B_p — энергия фононов (оптических либо акустических); $\nu(p)$ — фурье — образ энергии взаимодействия экситонов; $\theta(p)$ — фурье — образ энергии взаимодействия экситонов с фононами; V — объем кристалла; N_a — число атомов в решетке.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Академики АН МССР Я. С. Гросул (гл. редактор), В. А. Андрунакиевич (зам. главного редактора), кандидаты физико-математических наук В. А. Коварский, Т. И. Малиновский, В. В. Соболев, Д. В. Гицу, В. Н. Ланге, А. Е. Маринчук



a_p^+ , a_p и b_p^+ , b_p — операторы рождения и уничтожения экситонов и фононов соответственно.

По-видимому имеет смысл рассматривать три предельных случая взаимодействия в экситон-фононной системе:

1. Случай слабой связи ($\theta(p)$ мало):

а) экситон-фононное взаимодействие больше экситон-экситонного. Такое предположение означает, что вначале происходит изменение положений экситонных уровней и эффективных масс экситонов, а потом взаимодействие между ними. Разумеется, такой случай может иметь место, если это изменение больше энергий связи двух экситонов;

б) экситон-фононное взаимодействие меньше экситон-экситонного. Это предположение сводится к тому, что вначале устанавливаются связанные состояния, если таковые существуют, а потом происходит изменение уровня и эффективной массы системы из двух экситонов. Критерий применимости этого предположения обратен критерию случая 1а.

2. Случай сильной связи. Он, очевидно, актуален в ионных кристаллах. Рассмотрим случай 1а. Произведем каноническое преобразование гамильтониана (1), выбрав производящую функцию S в виде:

$$S = \sum_{pp'} S^{(1)}(p-p') a_p^+ a_p b_{p-p'} - S^{(2)}(p-p') a_p^+ a_p b_{p-p}^+ \quad (2)$$

В результате в первом порядке теории возмущений получим:

$$\begin{aligned} H = & \sum_p \left\{ \Delta + T_p + \frac{1}{Na} \sum_{p'} \frac{\theta^2(p-p') B_{p-p'}}{(T_p - T_{p'})^2 - B_{p-p'}^2} \right\} a_p^+ a_p + \sum_p B_p b_p^+ b_p + \\ & + \frac{1}{Na} \sum_{pp'qq'} \left\{ \frac{\nu(p-p')}{2v_0} + \frac{\theta^2(p-p') B_{p-p'}}{(T_p - T_{p'})^2 - B_{p-p'}^2} \right\} \delta_{kp} (p+q-p'-q') a_p^+ a_q^+ a_p a_q + \\ & + \frac{1}{2Na} \sum_{pp'q} \frac{\theta(q-p) \theta(p-p')}{T_p - T_{p'} - B_{p-p'}} a_q^+ a_p b_{p-p'} (b_{q-p} - b_{p-q}^+) - \\ & - \frac{1}{2Na} \sum_{pp'q} \frac{\theta(p-p') \theta(p-q)}{T_p - T_{p'} + B_{p-p'}} a_q^+ a_p b_{p-p}^+ (b_{q-p} - b_{p-q}^+) - \\ & - \frac{1}{2Na} \sum_{pp'q'} \frac{\theta(p-p') \theta(p'-q')}{T_p - T_{p'} - B_{p-p'}} a_p^+ a_{q'} b_{p-p'} (b_{p'-q'} - b_{q'-p'}^+) + \\ & + \frac{1}{2Na} \sum_{pp'q'} \frac{\theta(p-p') \theta(p'-q')}{T_p - T_{p'} + B_{p-p'}} a_p^+ a_{q'} b_{p-p}^+ (b_{p'-q'} - b_{q'-p'}^+) \quad (3) \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что если в (3) произвести усреднение произведений одночастичных фононных и экситонных операторов, то мы получим гамильтониан, состоящий из гамильтонианов «свободных» экситонов и фононов с измененной эффективной массой экситонов, измененной частотой фононов и члена экситон-экситонного взаимодействия.

Для определения энергии связанного состояния двух экситонов введем температурные двухвременные, двухчастичные запаздывающие и опережающие экситонные функции Грина

$$\begin{aligned} G_{f_1, f_2, g_1, g_2}^r(t-t') &= \ll a_{f_1}^+(t) a_{f_2}^+(t), a_{g_1}(t') a_{g_2}(t') \gg^r = \\ &= -i\theta(t-t') \langle [a_{f_1}^+(t) a_{f_2}^+(t), a_{g_1}(t') a_{g_2}(t')] \rangle; \\ G_{f_1, f_2, g_1, g_2}^a(t-t') &= i\theta(t'-t) \langle [a_{f_1}^+(t) a_{f_2}^+(t), a_{g_1}(t') a_{g_2}(t')] \rangle \quad (4) \end{aligned}$$

и составим для них уравнение движения. Затем произведем такое расщепление входящих в уравнение трехчастичных функций Грина, которое соответствовало бы учету связанных состояний двух экситонов:

$$\begin{aligned} \ll a_{p_1}^+(t) a_{p_2}^+(t) a_{p_3}(t) a_{p_4}^+(t), a_{g_1}(t') a_{g_2}(t') \gg &= \langle a_{p_1}^+ a_{p_2} \rangle \ll a_{p_1}^+ a_{p_2}^+, a_{g_1} a_{g_2} \gg + \\ &+ \langle a_{p_3}^+ a_{p_4} \rangle \ll a_{p_1}^+ a_{p_2}^+, a_{g_1} a_{g_2} \gg + \langle a_{p_1}^+ a_{p_2} \rangle \ll a_{p_3}^+ a_{p_4}^+, a_{g_1} a_{g_2} \gg; \\ \ll a_{p_1}^+(t) a_{p_2}^+(t) b_{p_3-p'}(t) (b_{p_3-p'}(t) - b_{f-p_2}^+(t)), a_{g_1}(t') a_{g_2}(t') \gg &= \\ &= -\langle b_{p_3-p'} b_{f-p_2}^+ \rangle \ll a_{p_1}^+ a_{p_2}^+, a_{g_1} a_{g_2} \gg. \quad (5) \end{aligned}$$

Используя (5) и переходя к фурье-образу функции Грина

$$G(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(E) e^{-iE(t-t')} dE,$$

получим приближенное уравнение для связанных состояний двух экситонов:

$$E_a U_a(f_1, f_2) = [E_{f_1} + E_{f_2}] U_a(f_1, f_2) + \sum_p K(p, f_1, f_2) U_a(p, f_1 + f_2 - p) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} E_{f_1} + E_{f_2} = & - \left\{ 2\Delta + T_{f_1}^+ + T_{f_2}^- + \frac{1}{Na} \sum_{p'} \left[\frac{\theta^2(f_1-p') B_{f_1-p'}}{(T_{f_1}^+ - T_{p'})^2 - B_{f_1-p'}^2} + \right. \right. \\ & + \left. \frac{\theta^2(f_2-p') B_{f_2-p'}}{(T_{f_2}^- - T_{p'})^2 - B_{f_2-p'}^2} \right] + \frac{2v_0 N}{V} + \frac{1}{Na} \sum_p \left[\left(\frac{\nu(\vec{f}_1 - p)}{V_0} + \frac{\nu(\vec{f}_2 - p)}{V_0} + \right. \right. \\ & + \left. \frac{2\theta^2(\vec{f}_1 - p) B_{f_1-p}}{(T_{f_1}^+ - T_p)^2 - B_{f_1-p}^2} + \frac{2\theta^2(\vec{f}_2 - p) B_{f_2-p}}{(T_{f_2}^- - T_p)^2 - B_{f_2-p}^2} \right] \bar{n}_p - \\ & - \frac{1}{2} \left[\frac{\theta^2(f_1-p)}{T_p - T_{f_1} - B_{p-f_1}} (1 + 2\sqrt{p-f_1}) + \frac{\theta^2(p-f_1)}{T_p - T_{f_1} + B_{p-f_1}} (1 + 2\sqrt{f_1-p}) + \right. \\ & + \left. \frac{\theta^2(p-f_2)}{T_p - T_{f_2} - B_{p-f_2}} (1 + 2\sqrt{p-f_2}) + \frac{\theta^2(p-f_2)(1 + 2\sqrt{f_2-p})}{T_p - T_{f_2} + B_{p-f_2}} \right] \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K(\vec{p}, \vec{f}_1, \vec{f}_2) = & - \frac{1}{Na} \left[\frac{\nu(\vec{p}-\vec{f}_1)}{2V_0} + \frac{\nu(\vec{p}-\vec{f}_2)}{2V_0} + \frac{\theta^2(p-f_1) B_{p-f_1}}{(T_p - T_{f_1})^2 - B_{p-f_1}^2} + \right. \\ & + \left. \frac{\theta^2(\vec{p}-\vec{f}_2) B_{p-f_2}}{(T_p - T_{f_2})^2 - B_{p-f_2}^2} \right] (1 + \bar{n}_{f_1} + \bar{n}_{f_2}). \quad (8) \end{aligned}$$

Здесь N — полное число экситонов в кристалле; v_0 — объем элементарной ячейки; $\bar{n}_p = \langle a_p^+ a_p \rangle$; $\bar{v}_p = \langle b_p^+ b_p \rangle$. В уравнение (6) входят $E_{f_1} + E_{f_2}$ — собственная энергия двух экситонов в самосогласо-

ванном поле [8] и $\sum_{\vec{p}} K(\vec{p}, \vec{f}_1, \vec{f}_2)$ — энергия взаимодействия двух экситонов.

Члены типа $\frac{0^2(\rho) B_p}{T_p^2 - B_p^2}$, входящие в (8), определяют изменение биэкситонного уровня за счет экситон-фононного взаимодействия. Систему собственных функций уравнения (6) определим как фурье-образы функций биэкситона:

$$U_\alpha(f_1, f_2) = \frac{\delta_{кр}(f_1 + f_2 + k)}{\sqrt{V}} \left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^{3/4} e^{-\frac{|f_1 - f_2|^2}{16\alpha}}$$

Здесь K — квазимпульс биэкситона; α — вариационный параметр. Общее выражение для $V(R_1 - R_2)$, фурье-образом которой является входящая в (6) величина $\nu(\rho)$, получено нами для модели кристалла типа твердый гелий. Численный расчет ведется на электронной вычислительной машине. Этот расчет мы используем для вычисления энергии связанного состояния двух экситонов.

В заключение считаю своим приятным долгом выразить глубокую благодарность С. А. Москаленко за руководство работой.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Varsanyi and G. H. Dicke. Phys. Rev. Lett. 7, 442 (1961).
2. A. Milgram and M. P. Givens. Phys. Rev. 125, 1506 [1962].
3. D. L. Dexter. Phys. Rev. 126, № 6 (1962).
4. M. A. Lampert. Phys. Rev. Lett. 1, № 12, (1958).
5. С. А. Москаленко. ЖОС т. 5, стр. 147, 1958 г.
6. E. Hylleraas, A. Ore. Phys. Rev. 71, № 8, 493 (1947).
7. А. И. Бобрышева. Известия АН МССР (в печати).
8. Wyld and Fried. Annals of Physics. 23, № 3 (1963).

А. И. БОБРЫШЕВА

КУ ПРИВИРЕ ЛА ИНТЕРАКЦИУНЯ ЭКСЧИТОНИЛОР ЫН РЕЦЯУА ДЕФОРМАБИЛЭ

Резумат

Се консидерэ интеракциуня ынтр'ун систем дин экситонь ши фононь ын казул уней слабе легэтурь. Се пресупуне кэ интеракциуня экситонилор ку фононий е май маре декыт интеракциуня экситонилор ку экситонь. Фолосинду-се теория пертурбациилор ын формэ каноникэ, а фост обцинут гамилтонианул системулуй дин экситонь ши фононь. Ку ажуртул функциилор луй Грин се дедуче о екуацие дин каре поате фи обцинутэ енергия комплексулуй, алжэтуит дин дой экситонь.

Ю. С. БОЯРСКАЯ, Р. П. ЖИТАРУ

О ПОЛЯРНОСТИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НА ГРАНИ (III) МОНОКРИСТАЛЛОВ NaCl

1. ВВЕДЕНИЕ

На грани (III) монокристаллов NaCl, как и на соответствующих гранях других щелочногалогенных кристаллов, проявляется полярность механических свойств вдоль направлений $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$. Вначале эта полярность была обнаружена при испытаниях на твердость методом царапания, когда оказалось, что твердость вдоль направлений $[\bar{1}\bar{1}2]$, $[1\bar{2}\bar{1}]$ и $[2\bar{1}\bar{1}]$ больше, чем вдоль направлений $[11\bar{2}]$, $[1\bar{2}1]$ и $[\bar{2}11]$ (рис. 1) [1-3].

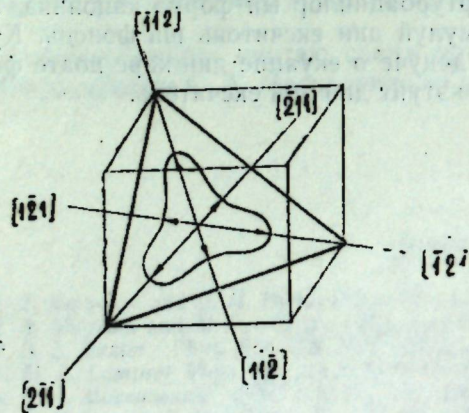


Рис. 1. Розетка твердости на грани (111) монокристаллов NaCl. Стрелки указывают направления царапания.

Затем было установлено, что полярность проявляется как в распределении дислокаций вокруг отпечатков, получаемых при вдавливании индентора в грань (111), так и в распределении дислокаций вокруг царапин, идущих вдоль полярных направлений [4].

Цель настоящей работы — более детальное исследование этого явления и выяснение причины анизотропии твердости.

2. Методика эксперимента

Грань (III) получалась путем шлифовки и последующей химической полировки. Для снятия деформированного слоя, возникшего при шлифовке, сначала применялся быстросействующий полирующий раствор (80% этилового спирта и 20% воды). Затем производилась более медленная полировка раствором, подобным описанному ранее (75% метилового спирта, 9% этилового спирта и 16% воды) [4].

Методом избирательного травления (в качестве травителя применялась уксусная кислота) на поверхности выявлялись области, свободные от дислокаций. В этих областях при помощи микротвердометра ПМТ-3 (нагрузки на пирамиду равнялись 1—5 г) наносились отпечатки и проводились царапины вдоль направлений $[\bar{1}\bar{1}2]$ и $[11\bar{2}]$. Затем путем последовательного сплирования и травления изучалась структура распределения дислокационных зон вокруг отпечатков и царапин. При-

чем, производя многократное травление после каждой полировки, удалось наблюдать за движением дислокаций, происходящим под действием травителя*. Это дало дополнительные сведения об особенностях дислокационной структуры, возникающей при деформировании грани (III) путем вдавливания и царапания.

3. Экспериментальные данные и их обсуждение

Распределение дислокаций вокруг отпечатков индентора имело следующий вид. В центре наблюдалась плотная дислокационная масса, бесформенная при малых нагрузках (1—2 г, рис. 2а) и довольно часто

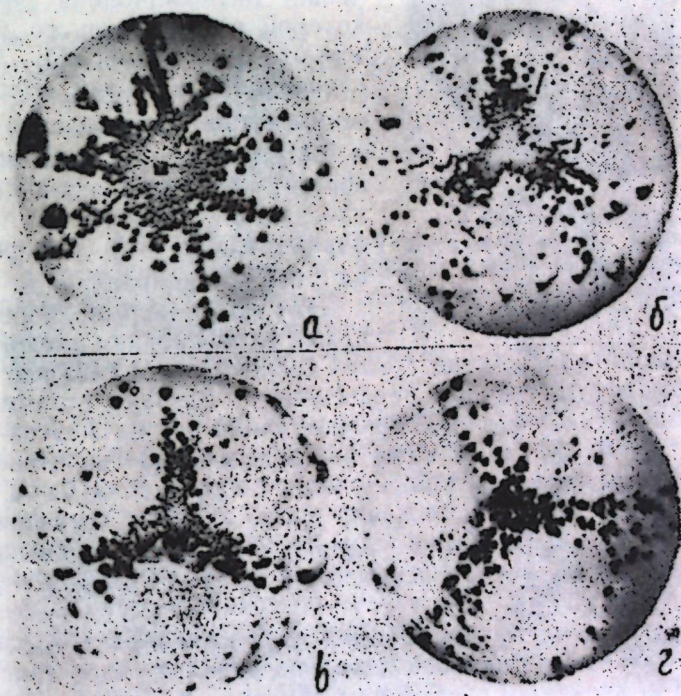


Рис. 2. Изменение формы распределения дислокаций вокруг отпечатка, нанесенного при малых нагрузках (1—2 г), по мере сплирования поверхности: а — до сплирования; б — на глубине 4,5 мк; в — на глубине 11 мк; г — на глубине 35 мк $\times 200$.

принимая форму треугольника при больших нагрузках (рис. 3)**. От сплошной массы отходили дислокационные ряды, идущие по направлениям $\langle 110 \rangle$. Очевидно, они состоят из краевых дислокаций, лежащих в плоскостях (101), (011), (110).

Это подтвердилось наблюдениями за движением дислокаций. Дислокации двигались по направлениям $\langle 110 \rangle$, причем число дислокаций, двигавшихся к центру отпечатка, примерно равнялось числу дислока-

* Движение дислокаций под действием травителя на грани (001) LiF было подробно описано в работах [5, 6].

** Вопрос о причинах появления треугольной области обсуждался подробно в работе [4], поэтому здесь мы его касаться не будем.

ций, двигавшихся от центра отпечатка. Смещения дислокаций (l) за время одного травления, которое равнялось 1—2 минутам*, были невелики. Так у 66% дислокаций $l \leq 8$ мк, у 26% дислокаций $8 \text{ мк} \leq l \leq 16$ мк и у 8% $16 \text{ мк} \leq l \leq 33$ мк. Движения дислокаций, за редким исключением, были однократными, т. е. один раз сдвинувшаяся дислокация при последующих травлениях оставалась неподвижной.

По мере споллирования поверхности форма распределения дислокаций вокруг отпечатка менялась следующим образом. Сначала проявлялась трехлучевая дислокационная розетка, лучи которой расширялись по мере удаления от центра (рис. 2б). Затем лучи становились ровными полосами, идущими вдоль направлений $[11\bar{2}]$, $[1\bar{2}1]$ и $[\bar{2}11]$ (рис. 2в). Очевидно, эти лучи состоят из дислокаций, лежащих в плоскостях скольжения, перпендикулярных грани (III) и пересекающихся с ней по направлениям $\langle 11\bar{2} \rangle$ **.

Это также подтвердилось наблюдениями за движением дислокаций. В са-

мом деле, было обнаружено, что дислокации движутся вдоль лучей. Причем, в отличие от предыдущего случая (движения вдоль $\langle 110 \rangle$), здесь наблюдалось больше движений от центра отпечатка, чем к центру. Здесь также чаще наблюдалось многократное движение дислокаций. Средняя величина смещений дислокаций была, примерно, такой же, как и в случае движений вдоль $\langle 110 \rangle$. Хотя при движении вдоль $\langle 11\bar{2} \rangle$ несколько чаще наблюдались большие l . Так, у 72% дислокаций $l \leq 8$ мк, у 8% дислокаций $8 \text{ мк} \leq l \leq 16$ мк и у 20% дислокаций $16 \text{ мк} \leq l \leq 75$ мк.

При дальнейшем споллировании лучи становились более редкими, а в центре розетки оставалось довольно плотное ядро (рис. 2г). Возможно, это объясняется следующим образом. В дислокационной розетке имеются полупетли дислокаций, одни концы которых лежат в лучах, а другие — в центре розетки. Так как лучей — 3, то в центре должна быть большая плотность дислокаций, чем в лучах. Справедливость высказанного предположения подтверждается некоторыми наблюдениями за движением дислокаций в лучах. Так, при наблюдениях за одной из дислокационных розеток оказалось, что в одном из ее лучей большинство дислокаций смещается вдоль луча по направлению к центру, а в другом вдоль луча по направлению от центра. Это свидетельствует о том, что большинство дислокаций, составляющих лучи, — одного знака. Следовательно, они являются одними концами дислокационных полупетель, а другие концы — дислокации противоположного знака — должны лежать где-то в центре розетки. Интересно отметить, что смещения дислокаций по направлению к центру были гораздо меньшими

* Размеры остроконечных ямок продвинувшихся дислокаций равнялись, примерно, размерам дна плоскодонных ямок, характеризующих первоначальное положение дислокаций. Отсюда следует, что дислокации движутся лишь в течение малой доли всего времени травления.

** Таковыми плоскостями являются (101) , $(0\bar{1}1)$, $(\bar{1}10)$.



Рис. 3. Форма дислокационной розетки, возникающей вокруг отпечатка, при нагрузке на пирамиду 3 г. Фотография в темном поле. $\times 340$.

(в пределах своих ямок травления), чем по направлению от центра. Последнее движение иллюстрируется рис. 4.

Отметим однако, что методом последовательного споллирования в лучах были обнаружены и дислокационные полупетли, оба конца которых лежали в луче. Размеры этих полупетель были в интервале 4—40 мк. Узкие полупетли (4 мк) выглядели то как одна дислокация (наблюдалась одна ямка травления из-за очень малого расстояния между выходами концов полупетли), то как две. Иногда наблюдались и дислокационные полупетли, расположенные перпендикулярно или под углом к лучу.

Интересно отметить еще такую дислокационную полупетлю. Сначала наблюдалась одна дислокационная ямка травления. Затем она раздвоилась, и расстояние между этими дислокациями возросло до 34 микрон. Потом они одновременно споллировались.

На основании всех наблюдений, проведенных над распределением дислокаций вокруг отпечатков индентора, была построена схема изменения дислокационной розетки по мере удаления от поверхности кристалла (рис. 5).

Менее подробно были изучены дислокационные зоны царапин, идущих по направлениям $[1\bar{1}\bar{2}]$ и $[11\bar{2}]$ *. Однако наблюдение за движением дислокаций в зонах этих царапин позволило установить некоторые интересные закономерности. Оказалось, что можно выделить направления, по которым движется большинство дислокаций. Особенно это относится к дислокациям, двигавшимся в зонах царапин, идущих вдоль $[11\bar{2}]$.

Для наглядного представления о сказанном были построены схемы, представленные на рис. 6**. Здесь отрезки, отложенные по соответствующим направлениям, пропорциональны количеству движений, наблюдавшихся по этим направлениям. Из рассмотрения схем следует, что в зонах тех и других царапин встречаются движения всех видов, т. е. в зонах имеются дислокации, лежащие во всех плоскостях скольжения. Однако в зонах царапин, идущих вдоль $[11\bar{2}]$, большинство дислокаций

* Изменение общего вида дислокационных зон этих царапин по мере споллирования поверхности было описано ранее (4).

** Схемы были построены на основании наблюдений за движением дислокаций в зонах нескольких царапин, идущих вдоль $[11\bar{2}]$ и $[1\bar{1}\bar{2}]$. Всего в зонах каждой царапин наблюдалось по 103 движения. При определении масштаба отрезков на схемах это число движений нужно поделить на длину отрезков, расположенных в интервале от $[11\bar{2}]$ до $[11\bar{2}]$.



Рис. 4. Движение дислокаций в конце луча дислокационной розетки при трех последовательных травлениях (а, б, в). Стрелка показывает направление луча. $\times 200$.

движется вдоль этого направления. Это дислокации, лежащие в плоскостях скольжения $(\bar{1}10)$. Поэтому можно заключить, что при царапании вдоль направления $[11\bar{2}]$ деформирование, в основном, развивается по плоскостям $(\bar{1}10)$. Такого ярко выделенного направления преимущественного движения не наблюдалось в случае царапин, идущих вдоль $[\bar{1}\bar{1}2]$. Поэтому в этом случае нельзя выделить плоскость скольжения, по которой деформирование развивается значительно легче, чем по другим. Однако по направлениям $[\bar{1}2\bar{1}]$ и $[\bar{2}1\bar{1}]$ (направления такого же типа, как направление преимущественного движения в первом случае) наблюдается больше движений, чем по остальным.

Из всего изложенного можно заключить следующее. Полярность механических свойств на грани (III) NaCl, проявляемая по направлениям $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ (различие в твердости, вид дислокационной розетки вокруг отпечатка, различие в дислокационных зонах царапин), связана, в основном, с перпендикулярными к этой грани плоскостями скольжения.*

Рис. 5. Схема изменения дислокационной розетки, возникающей вокруг отпечатка индентора, при последовательном сплоривании поверхности. Области, более густо заштрихованные, являются более глубокими.

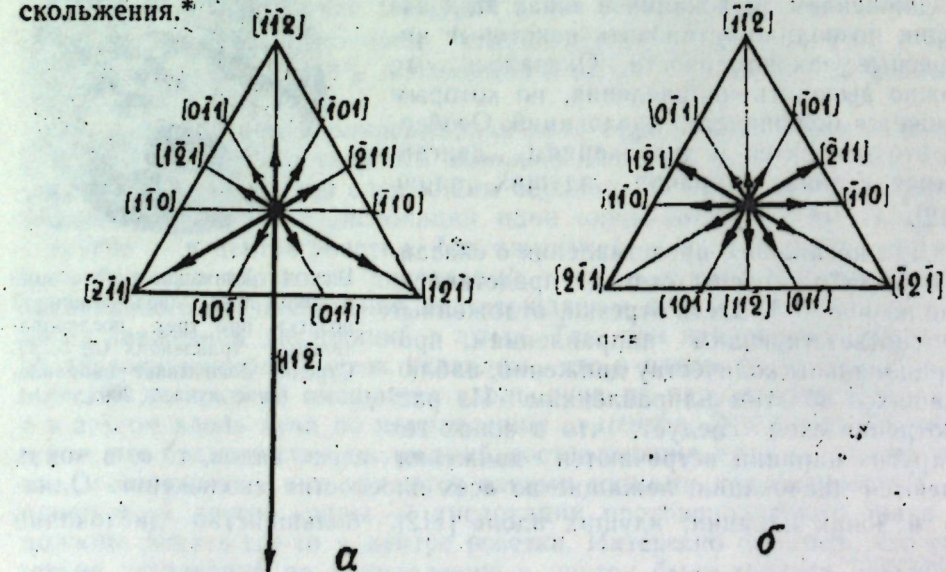


Рис. 6. Схемы, характеризующие направление движений дислокаций в зонах царапин, идущих вдоль $[11\bar{2}]$ (а) и вдоль $[\bar{1}\bar{1}2]$ (б).

* Этот вывод не подтвердил высказанное ранее мнение, что анизотропия твердости на грани (III) связана, в основном, с плоскостями скольжения, не перпендикулярными к этой грани [2].

Для выяснения в общих чертах причины этого явления рассмотрим расположение грани $(\bar{1}10)$ и ее направления скольжения $[110]$ относительно направлений $[\bar{1}\bar{1}2]$ и $[11\bar{2}]$ (рис. 7).

Если усилие действует в направлении $[\bar{1}\bar{1}2]$, то в плоскости $(\bar{1}10)$ в направлении скольжения $[110]$ возникает напряжение, направленное к поверхности кристалла (рис. 7а), которое поэтому не может вызвать развитие деформации в глубь кристалла. Если же усилие действует в направлении $[11\bar{2}]$, то напряжение в плоскости скольжения, действующее вдоль $[110]$, направлено в глубь кристалла и может вызвать развитие скольжения по этой плоскости.

Когда сосредоточенная сила действует на грань (III), то возникают усилия, действующие во все стороны от места приложения силы. Усилия, действующие по направлениям $[11\bar{2}]$, $[\bar{1}2\bar{1}]$ и $[\bar{2}1\bar{1}]$, вызывают развитие скольжения по плоскостям $(\bar{1}10)$, $(\bar{1}01)$ и $(0\bar{1}1)$ соответственно. Поэтому по этим направлениям возникают лучи из дислокаций. Усилия, действующие по направлениям $[\bar{1}\bar{1}2]$, $[\bar{1}2\bar{1}]$ и $[\bar{2}1\bar{1}]$, не вызывают развития скольжения по этим плоскостям. Поэтому в этих направлениях нет дислокационных лучей и дислокационная розетка является трехлучевой, ярко свидетельствуя о полярности свойств вдоль направлений $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$.

Если учесть, что царапание по данному направлению проводится под действием усилия, действующего по этому направлению, то на основании проведенных рассуждений становится понятной как анизотропия твердости*, так и различие дислокационных зон царапин, идущих вдоль направлений $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$.

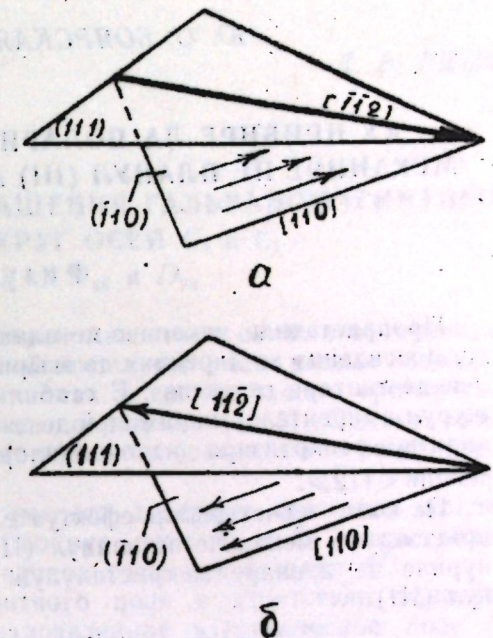


Рис. 7. Схема, поясняющая возникновение полярности механических свойств на грани (III)

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Д. Кузнецов, Поверхностная энергия твердых тел, ГИТТЛ, 1954, 54—55.
2. Ю. С. Боярская, Ученые записки Кишиневского госуниверситета, 17, 159 (1955).
3. Ю. С. Боярская, М. И. Вальковская, Кристаллография, 7, 261 (1962).
4. Ю. С. Боярская, М. И. Вальковская, ФТТ, 5, 2324 (1963).
5. В. Б. Парийский, А. И. Ландау, В. И. Старцев, ФТТ, 5, 1377 (1963).
6. В. Б. Парийский, А. И. Ландау, В. М. Боржжовская, ФТТ, 5, 2570 (1963).

* Твердость минимальна по тем направлениям, по которым развиваются дислокационные лучи, и максимальна по противоположным.

Ю. С. БОЯРСКАЯ, Р. П. ЖИТАРУ

КУ ПРИВИРЕ ЛА ПОЛАРИТАТЯ ПРОПРИЕТЭЦИЛОР
МЕКАНИЧЕ ПЕ ПЛАНУЛ (III) АЛ МОНОКРИСТАЛЕЛОР NaCl

Резумат

Проприетэциле механиче пе планул (III) ал монокристалелор NaCl ын депенденца де дирекция де згыриере се студиязэ ку ажуторул методей де типтаре селективэ. Е стабилитэ репартизаря дислокацилор ын журул амирентелор пирамидей де диамант. Де асемени е студиятэ мишкаря ши репартизаря дислокацилор де-а лунгул згыриетурилор ын дирекция $\langle 11\bar{2} \rangle$.

Пе база черчетэрилор, ефектуате с'а стабилит кэ поларитатя проприетэцилор механиче пе планул (III) е легатэ ын маре парте де плануриле де лункаре а кристалулуй ориентате перпендикуляр ку планул (III).

Д. В. ГИЦУ

О СТРУКТУРЕ ДИАГРАММ ВРАЩЕНИЯ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ
ЭФФЕКТОВ ВОКРУГ ОСЕЙ C_4 И C_2
В КРИСТАЛЛАХ D_{4h} И D_{2h}

Как известно, зависимость гальваномагнитных свойств от ориентации кристаллографических осей в общем случае имеет весьма сложный характер даже в кубических кристаллах и до настоящего времени не поддается строгой теоретической интерпретации [1—3]. Однако качественную картину анизотропии этих эффектов сравнительно легко получить феноменологически [4, 5].

Ниже приведены результаты расчета диаграмм вращения магнитосопротивления и поля Холла вокруг осей C_4 и C_2 в кристаллах D_{4h} и D_{2h} при $H \rightarrow 0$ с учетом членов разложения выше H^2 .

В приближении слабого магнитного поля в отсутствие температурного градиента произвольно направленное электрическое поле E_i связано с плотностью тока I_j в кристалле и магнитным полем H соотношением [6].

$$E_i = \rho_{ij} I_j + \rho_{ij,kl} I_j H_k H_l + \rho_{ij,klmn} I_j H_k H_l H_m H_n + \dots + R_{ij,k} I_j H_k + R_{ij,klm} I_j H_k H_l H_m + \dots \quad (1)$$

где $\rho_{ij,kl} \dots$ и $R_{ij,k} \dots$ тензорные величины, структура которых определяется симметрией кристалла.

Если выбрать систему координат обычным способом [7], то гальваномагнитные коэффициенты рассматриваемых типов кристаллов имеют вид:

а) Кристаллы D_{4h} .

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} \end{pmatrix}, \quad (2) \quad R_{ij,k} = \begin{pmatrix} R_{23,1} & 0 & 0 \\ 0 & R_{23,1} & 0 \\ 0 & 0 & R_{12,3} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\rho_{ij,kl} = \begin{pmatrix} \rho_{11,11} & \rho_{11,22} & \rho_{33,11} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,22} & \rho_{11,11} & \rho_{33,11} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,33} & \rho_{11,33} & \rho_{33,33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{23,23} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,12} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$R_{ij,klm} = \begin{pmatrix} R_{23,111} & 0 & 0 & R_{23,122} & 0 & R_{23,133} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R_{31,112} & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{31,222} & 0 & R_{31,233} & 0 \\ 0 & 0 & R_{12,113} & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{12,223} & 0 & R_{12,333} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\rho_{ij,klmn} = \begin{pmatrix} \rho_{11,1111} & \rho_{11,2222} & \rho_{33,1111} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,2222} & \rho_{11,1111} & \rho_{33,1111} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,3333} & \rho_{11,3333} & \rho_{33,3333} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,1122} & \rho_{11,1122} & \rho_{33,1122} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,1133} & \rho_{11,2233} & \rho_{33,1133} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,2233} & \rho_{11,1133} & \rho_{33,1133} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,1123} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{23,2223} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,1112} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,2223} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{23,1123} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,2212} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,3323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{23,3323} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,3312} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

б) Кристаллы D_{2h}

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} \end{pmatrix}, \quad (7) \quad R_{ij,k} = \begin{pmatrix} R_{23,1} & 0 & 0 \\ 0 & R_{31,2} & 0 \\ 0 & 0 & R_{12,3} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\rho_{ij,kl} = \begin{pmatrix} \rho_{11,11} & \rho_{22,11} & \rho_{33,11} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,22} & \rho_{22,22} & \rho_{33,22} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,33} & \rho_{22,33} & \rho_{33,33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{13,13} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,12} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$R_{ij,klm} = \begin{pmatrix} R_{23,111} & 0 & 0 & R_{23,122} & 0 & R_{23,133} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & R_{31,112} & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{31,222} & 0 & R_{31,233} & 0 \\ 0 & 0 & R_{12,113} & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{12,223} & 0 & R_{12,333} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\rho_{ij,klm} = \begin{pmatrix} \rho_{11,1111} & \rho_{22,1111} & \rho_{33,1111} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,2222} & \rho_{22,2222} & \rho_{33,2222} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,1122} & \rho_{22,1122} & \rho_{33,1122} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,3333} & \rho_{22,3333} & \rho_{33,3333} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,1133} & \rho_{22,1133} & \rho_{33,1133} & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{11,2233} & \rho_{22,2233} & \rho_{33,2233} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,1123} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{13,1113} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,1112} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,2223} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{13,2213} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,2212} \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{23,3323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{13,3313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{12,3312} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

Рассмотрим частный случай, когда ток направлен вдоль оси C_n ($n=2,4$), а магнитное поле H перпендикулярно I . В этом случае:

$$\begin{aligned} I_1 &= 0, & H_1 &= H \cos \vartheta, \\ I_2 &= 0, & H_2 &= H \sin \vartheta, \\ I_3 &= I, & H_3 &= 0, \end{aligned} \quad (12)$$

где ϑ — угол между одной из осей C_2 и направлением магнитного поля.

Составляющая электрического поля E_T вдоль тока равна:

а) $\vec{I} \parallel C_1$ (кристаллы D_{4h})

$$\begin{aligned} E_T &= \rho_3 I + \rho_{3,1} IH^2 + \frac{1}{4} [3(\rho_{3,11} + \rho_{3,12}) + (\rho_{3,11} - 3\rho_{3,12}) \cos 4\vartheta] IH^4 + \\ &+ \frac{1}{8} [5(\rho_{3,111} + 3\rho_{3,112}) + 3(\rho_{3,111} - 5\rho_{3,112}) \cos 4\vartheta] IH^6 + \frac{1}{64} [35(\rho_{3,1111} + \\ &+ 4\rho_{3,1112} + 3\rho_{3,1122}) + 28(\rho_{3,1111} - 4\rho_{3,1112} - 5\rho_{3,1122}) \cos 4\vartheta + \\ &+ (\rho_{3,1111} - 2\rho_{3,1112} + 35\rho_{3,1122}) \cos 8\vartheta] IH^8 + \dots, \end{aligned} \quad (13)$$

б) $\vec{I} \parallel C_2$ (кристаллы D_{4h} и $4D_{2h}$)

$$\begin{aligned} E_T &= \rho_{11} I + \frac{1}{2} [(\rho_{1,2} + \rho_{1,3}) + (\rho_{1,3} - \rho_{1,2}) \cos 2\vartheta] IH^2 + \\ &+ \frac{1}{8} [3(\rho_{1,22} + 2\rho_{1,23} + \rho_{1,33}) + (\rho_{1,33} - \rho_{1,22}) \cos 2\vartheta + (\rho_{1,22} - 6\rho_{1,23} + \\ &+ \rho_{1,33}) \cos 4\vartheta] IH^4 + \dots \end{aligned} \quad (14)$$

(В (13) и (14) обозначено $11 \rightarrow 1; 22 \rightarrow 2; 33 \rightarrow 3$).

Угловая зависимость составляющей $E_{ij\bar{m}\bar{n}}$ имеет аналогичный характер. Например, для первого случая получаем:

$$\begin{aligned} E_{ij\bar{m}\bar{n}} &= R_{4,1} IH + \frac{1}{4} [3(R_{4,11} + R_{4,12}) + (R_{4,11} - 3R_{4,12}) \cos 2\vartheta] IH^3 + \\ &+ \frac{1}{8} [5(R_{4,111} + 2R_{4,112} + R_{4,122}) + [3R_{4,111} - 5(2R_{4,112} + R_{4,122}) \cos 4\vartheta] IH^5 + \\ &+ \frac{1}{64} [35[R_{4,1111} - (3R_{4,1112} + R_{4,1222}) + 3R_{5,1122}] + 28[R_{4,1111} - \\ &- (3R_{4,1112} + R_{4,1222}) + R_{5,1122}] \cos 4\vartheta + [R_{4,1111} - 7(3R_{4,1112} + \\ &+ R_{4,1222}) + 35R_{5,1122}] \cos 8\vartheta] IH^7 + \dots \end{aligned}$$

Здесь обозначено: $11 \rightarrow 1, 22 \rightarrow 2$ (попарно встречающиеся), $23 \rightarrow 4, 31 \rightarrow 5$.

Обобщая полученные результаты, можно представить выражение для диаграмм вращения гальваномагнитных эффектов вокруг оси C_n в виде

$$E = \sum_l A_l(H) \cos ln\vartheta = A_0(H) + A_1(H) \cos n\vartheta + A_2(H) \cos 2n\vartheta + \dots \quad (16)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. J. P. Jan, Solid State Physics 5, 1 (1957).
2. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, УФН, 69, 419 (1959).
3. Н. Е. Алексеевский, Ю. П. Гайдукон. ЖЭТФ, 37, 672 (1959).
4. H. J. Juretschke, Acta Cryst, 8, 716 (1955).
5. Д. В. Гицу, Г. А. Иванов. Сборник «Исследования по полупроводникам», Кишинев, 94—111, 1964.
6. W. P. Mason, W. H. Hewitt, R. F. Wick, J. Appl. Phys. 24, 166 (1953).
7. Д. Най. Физические свойства кристаллов, ИЛ, 1960.

Д. В. ГИЦУ

ДЕСПРЕ СТРУКТУРА ДИАГРАМЕЛОР ДЕ РОТАЦИЕ А ЕФЕКТЕ-
ЛОР ГАЛВАНМАГНЕТИЧЕ ЫН ЖУРУЛ АКСЕЛОР C_1 ШИ C_2 ЫН
КРИСТАЛЕЛЕ D_{4h} ШИ D_{2h}

Резумат

С'а калкулат депенденца унгуларэ а феноменелор гальваномагнетиче ын журул акселор C_1 ши C_2 пентру кристалеле класей D_{4h} ши D_{2h} . Ачастэ депенденцэ поате фи експриматэ прин урмэтоаря серие:

$$E = A_0(H) + A_1(H) \cos n \vartheta + A_2(H) \cos 2n \vartheta + \dots$$

И. И. ЖЕРУ

СВЕРХТОНКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ВОЗБУЖДЕННОМ СОСТОЯНИИ F-ЦЕНТРА

Спин-гамильтониан сверхтонкого взаимодействия электрона F-центра, находящегося в основном состоянии, с магнитными моментами ядер ($I_k = \frac{3}{2}$) первой координационной сферы в приближении Хартри-Фока для ядер в кристалле типа NaCl состоит из семи слагаемых [1].

При возбуждении электрона появляется отличный от нуля орбитальный момент, что приводит к изменению характера взаимодействия между электронной и ядерной подсистемами.

Наиболее существенным в сверхтонком взаимодействии F-центра является контактный механизм, но он, по-видимому, не в состоянии разорвать спин-орбитальную связь. В типичном кристалле KCl изотропная константа фермиевского взаимодействия электрона с ближайшим к вакансии ядром калия равна $0,0077 \text{ см}^{-1}$, в то время как константа спин-орбитальной связи на p-уровне для калия равна 38 см^{-1} [2]. Внутрикристаллическое поле, созданное ближайшим окружением дефекта, не действует на электрон, находящийся в возбужденном состоянии ($L = 1$), так как уровни энергии, соответствующие значениям полного момента $\frac{1}{2}$ и $\frac{3}{2}$, не расщепляются в поле кубической симметрии [2]. В связи с этим рассмотрим вначале случай, когда связь моментов \vec{S} и \vec{L} не нарушена и оба они процессируют вокруг вектора полного момента \vec{J} .

Поскольку $L = 1$, квантовое число J может принимать значения $1/2$ и $3/2$. Поэтому

$$H_1 = H^{(1)} + H^{(2)}, \quad (1)$$

где $H^{(1)}$ и $H^{(2)}$ описывают сверхтонкое взаимодействие, когда полный момент электронной подсистемы равен $1/2$ и $3/2$ соответственно.

Оператор $H^{(1)}$ по форме совпадает со спин-гамильтонианом сверхтонкого взаимодействия F-центров в основном состоянии [1].

Оператор $H^{(2)}$ строится методом инвариантов, как это делается в [1] для $H^{(1)}$, с учетом того, что в этом случае электронная подсистема характеризуется 16 линейно-независимыми матрицами размерности 4×4 . В качестве последних используются матрицы операторов проекций полного момента для $J = 3/2$ и их комбинации.

Существуют 32 инварианта, допускаемые свойствами простран-

венной симметрии, так как столько раз содержится в прямом произведении

$$D_{1/2} \times D_{1/2}^* \times (\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4) \times D_{1/2} \times D_{1/2}^*$$

единичное представление [3]. Здесь $D_{1/2}$ и $D_{3/2}$ неприводимые представления группы вращений, а $(\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_4)$ — представление, по которому преобразуются узлы, окружающие вакансию.

Оператор $H^{(2)}$ имеет вид:

$$\begin{aligned} H^{(2)} = & \alpha_1 (\Gamma_1 \times \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_1) E \cdot E' + \\ & + \alpha_2 (\Gamma_1 \times \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_1) \sum_{k=1}^6 \bar{I}_{(k)} \bar{J} + \alpha_3 (\Gamma_3 \times \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_1) \cdot \\ & \cdot \sum_{k=1}^3 [3(I_{k,k} + I_{k,k'}) J_k - (I_{(k)} + I_{(k')}) \cdot J] + \\ & + \alpha_4 (\Gamma_3 \times \Gamma_3 \leftrightarrow \Gamma_1) \sum_{k=1}^3 [(I_{k,k}^2 + I_{k,k'}^2) - \frac{2}{3} I(I+1)] + \\ & + \alpha_5 (\Gamma_1 \times \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_1) \sum_{k=1}^6 (I_{x,k}^3 J_x + I_{y,k}^3 J_y + I_{z,k}^3 J_z) + \\ & + \alpha_6 (\Gamma_3 \times \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_1) \sum_{k,l,m=1}^3 [2(I_{k,k}^3 + I_{k,k'}^3) J_k - (I_{l,k}^3 + I_{l,k'}^3) J_l - \\ & - (I_{m,k}^3 + I_{m,k'}^3) J_m] + \alpha_7 (\Gamma_1 \times \Gamma_3 \leftrightarrow \Gamma_3) \sum_{k=1}^6 [I_{x,k}^2 J_x^2 + \\ & + I_{y,k}^2 J_y^2 + I_{z,k}^2 J_z^2 - \frac{1}{3} I(I+1)J(J+1)] + \\ & + \alpha_8 (\Gamma_1 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) \sum_{k=1}^6 [(\bar{I}_{(k)} \cdot \bar{J})^2 - (I_{x,k}^2 J_x^2 + I_{y,k}^2 J_y^2 + \\ & + I_{z,k}^2 J_z^2)] + \alpha_9 (\Gamma_3 \times \Gamma_3 \leftrightarrow \Gamma_3) \sum_{k,l,m=1}^3 [(I_{k,k}^2 + I_{k,k'}^2) J_k^2 + \\ & + (I_{l,k}^2 + I_{l,k'}^2) J_l^2 + (I_{m,k}^2 + I_{m,k'}^2) J_m^2 - \frac{2}{3} I(I+1)J(J+1)] + \\ & + \alpha_{10} (\Gamma_3 \times \Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_3) \cdot \sum_{k=1}^3 (E_{(k)} + E_{(k')}) [3J_k^2 - J(J+1)] + \\ & + \alpha_{11} (\Gamma_3 \times \Gamma_3 \leftrightarrow \Gamma_1) \cdot \sum_{k,l,m=1}^3 [(\eta_{m,k} + \eta_{m,k'}) J_m - (\eta_{l,k} + \eta_{l,k'}) J_l] + \\ & + \alpha_{12} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) \cdot \sum_{k=1}^3 [3(\xi_{k,k} + \xi_{k,k'}) \xi_k^{(e)} - (\xi_{(k)} + \xi_{(k')}) \cdot \xi^{(e)}] + \\ & + \alpha_{13} (\Gamma_1 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_4) \cdot \sum_{k=1}^6 (I_{x,k} J_x^3 + I_{y,k} J_y^3 + I_{z,k} J_z^3) + \\ & + \alpha_{14} (\Gamma_1 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_1) \cdot \sum_{k=1}^6 (I_{x,k}^3 J_x^3 + I_{y,k}^3 J_y^3 + I_{z,k}^3 J_z^3) + \\ & + \alpha_{15} (\Gamma_3 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_1) \cdot \sum_{k,l,m=1}^3 [2(I_{k,k} + I_{k,k'}) J_k^3 - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - (I_{l,k} + I_{l,k'}) J_l^3 - (I_{m,k} + I_{m,k'}) J_m^3 + \\
& + \alpha_{16} (\Gamma_3 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_4) \cdot \sum_{k,l,m=1}^3 [2(I_{k,k}^3 + I_{k,k'}^3) J_k^3 - \\
& - (I_{l,k}^3 + I_{l,k'}^3) J_l^3 - (I_{m,k}^3 + I_{m,k'}^3) J_m^3] + \\
& + \alpha_{17} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_4) \cdot \sum_{k,l,m=1}^3 [(\eta_{m,k} + \eta_{m,k'}) J_m^3 - \\
& - (\eta_{l,k} + \eta_{l,k'}) \cdot J_l^3] + \alpha_{18} (\Gamma_1 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) \cdot \sum_{k=1}^6 \vec{\eta}_{(k)} \cdot \vec{\eta}^{(e)} + \\
& + \alpha_{19} (\Gamma_3 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_5) \cdot \sum_{k,l,m=1}^3 [(I_{m,k} + I_{m,k'}) \eta_m^{(e)} - (I_{l,k} + I_{l,k'}) \cdot \eta_l^{(e)}] + \\
& + \alpha_{20} (\Gamma_3 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_5) \cdot \sum_{k,l,m=1}^3 [(I_{m,k}^3 + I_{m,k'}^3) \eta_m^{(e)} - \\
& - (I_{l,k}^3 + I_{l,k'}^3) \eta_l^{(e)}] + \alpha_{21} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) \cdot \sum_{k=1}^3 [3(\eta_{k,k} + \eta_{k,k'}) \eta_k^{(e)} - \\
& - (\vec{\eta}_{(k)} + \vec{\eta}_{(k')}) \cdot \vec{\eta}^{(e)}] + \alpha_{22} (\Gamma_1 \times \Gamma_2 \leftrightarrow \Gamma_2) \cdot (J_x J_y J_z + \\
& + J_z J_y J_x) \cdot \sum_{k=1}^6 (I_{x,k} I_{y,k} I_{z,k} + I_{z,k} I_{y,k} I_{x,k}), \quad (2)
\end{aligned}$$

где α_i ($i = 1, 2, 3, \dots, 22$) являются константами спин-гамильтониана, для каждой из которых указаны породившие ее представления. Через $\Gamma_y \times \Gamma_\mu \leftrightarrow \Gamma_j$ обозначено, что $\Gamma_y, \Gamma_\mu, \Gamma_j$ являются неприводимыми представлениями, по которым преобразуются узлы и соответственно комбинации матриц операторов проекций полного момента в ядерной и электронной подсистемах.

Здесь и далее индексы суммирования k, l, m переставляются циклически и не равны между собой. Одновременно индекс « k » нумерует узлы, когда он заключен в круглых скобках или встречается вместе (справа) с другим индексом при матрицах ядерной подсистемы; k и k' обозначают узлы, переходящие друг в друга при инверсии относительно вакансии. В (2) E и E' являются единичными 4×4 матрицами.

Выражения

$$\begin{aligned}
H_{23} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_4) &= \sum_{k,l,m=1}^3 [(\xi_{m,k} + \xi_{m,k'}) J_m - (\xi_{l,k} + \xi_{l,k'}) J_l] \\
H_{24} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_4) &= \sum_{k,l,m=1}^3 [(\xi_{m,k} + \xi_{m,k'}) J_m^3 - (\xi_{l,k} + \xi_{l,k'}) J_l^3] \\
H_{25} (\Gamma_3 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_5) &= \sum_{k,l,m=1}^3 [(I_{m,k} + I_{m,k'}) \xi_m^{(e)} - (I_{l,k} + I_{l,k'}) \xi_l^{(e)}] \\
H_{26} (\Gamma_3 \times \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_5) &= \sum_{k,l,m=1}^3 [(I_{m,k}^3 + I_{m,k'}^3) \xi_m^{(e)} - (I_{l,k}^3 + I_{l,k'}^3) \xi_l^{(e)}] \\
H_{27} (\Gamma_1 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) &= \sum_{k=1}^6 \vec{\xi}_{(k)} \cdot \vec{\eta}^{(e)} \quad (3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{28} (\Gamma_1 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) &= \sum_{k=1}^6 \vec{\eta}_{(k)} \cdot \vec{\xi}^{(e)} \\
H_{29} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) &= \sum_{k=1}^3 [3(\xi_{k,k} + \xi_{k,k'}) \eta_k^{(e)} - (\vec{\xi}_{(k)} + \vec{\xi}_{(k')}) \cdot \vec{\eta}^{(e)}] \\
H_{30} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5) &= \sum_{k=1}^3 [3(\eta_{k,k} + \eta_{k,k'}) \xi_k^{(e)} - (\vec{\eta}_{(k)} + \vec{\eta}_{(k')}) \cdot \vec{\xi}^{(e)}] \\
H_{31} (\Gamma_3 \times \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_2) &= (J_x J_y J_z + J_z J_y J_x) \sum_{k,l,m=1}^3 [(I_{l,k}^2 + I_{l,k'}^2) - (I_{m,k}^2 + I_{m,k'}^2)] \\
H_{32} (\Gamma_3 \times \Gamma_2 \leftrightarrow \Gamma_3) &= \sum_{k=1}^3 (I_{x,k} I_{y,k} I_{z,k} + I_{x,k'} I_{y,k'} I_{z,k'} + \\
& + I_{z,k} I_{y,k} I_{x,k} + I_{z,k'} I_{y,k'} I_{x,k'}) \cdot [3J_k^2 - J(J+1)]
\end{aligned}$$

не могут входить в $H^{(2)}$, так как они не удовлетворяют требованию инвариантности относительно преобразования обращения времени [1]:

$$U_J \cdot U_1 \cdot U_2 \dots U_6 \cdot H^* \cdot U_6^+ \dots U_2^+ \cdot U_1^+ \cdot U_J^+ = H \quad (4)$$

где U_J — унитарный оператор, действующий только на электронную подсистему;

U_k ($k = 1, 2, \dots, 6$) — унитарный оператор, действующий в спиновом пространстве ядра, находящегося в k -ом узле.

В (2) и (3) введены обозначения:

$$\xi_k = \frac{1}{2} (I_l I_m + I_m I_l) = \{ I_l I_m \} \quad (5)$$

$$\eta_{ik} = \frac{1}{2} [I_k (I_l^2 - I_m^2) + (I_l^2 - I_m^2) I_k] \quad (k = x, y, z).$$

Для электронной подсистемы выражения типа (5) обозначаются через $\xi_k^{(e)}$ и $\eta_k^{(e)}$.

Если разорвать связь моментов \vec{S} и \vec{L} , тогда они становятся независимыми и квантовое число J теряет физический смысл. В этом случае взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами описывается гамильтонианом:

$$H_2 = H^{(1)} + H^{(3)}, \quad (6)$$

где $H^{(1)}$ и $H^{(3)}$ характеризуют взаимодействие спина и орбитального момента электрона с ядерной спин-системой.

Для построения $H^{(3)}$ определим 9 линейно-независимых матриц 3×3 :

$$E'' L_x, L_y, L_z, L_x^2, L_y^2, \{L_y L_z\}, \{L_z L_x\} \text{ и } \{L_x L_y\}, \quad (7)$$

где E'' — единичная матрица;

L_x, L_y и L_z — матрицы операторов проекций момента количества движения для $L = 1$.

В представлении, в котором L_z диагональна, эти матрицы имеют вид (4):

$$L_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad L_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad L_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} \quad (8)$$

Матрицы (7) преобразуются по представлению $D_1 \times D_1^*$ [3], которое в кубической группе симметрии распадается на неприводимые представления [5, 6]:

$$D_1 \times D_1^* = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5. \quad (9)$$

Элементы классов двойной группы O_h , необходимые для выполнения фактического разложения $D_1 \times D_1^*$ на неприводимые представления, определены, используя выражение [7] для матричных элементов представления D_1 группы вращений*:

$$C_3(111) = D_1\left(\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0, \psi = \frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} -i & -\sqrt{2} & i \\ -\sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ -i & \sqrt{2} & i \end{vmatrix}$$

$$C_2(011) = D_1\left(\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0, \psi = \frac{\pi}{2}\right) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} -1 & \sqrt{2}i & 1 \\ -\sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 1 & \sqrt{2}i & -1 \end{vmatrix} \quad (10)$$

$$C_2(001) = D_1\left(\theta = 0, \varphi = \frac{\pi}{2}, \psi = \frac{\pi}{2}\right) = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$$C_4(001) = D_1\left(\theta = 0, \varphi = \frac{\pi}{2}, \psi = 0\right) = \begin{vmatrix} -i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & i \end{vmatrix}$$

Базисы неприводимых представлений (9) приведены в табл. 1.

Таблица 1
Неприводимые представления, содержащиеся
в $D_1 \times D_1^*$

Представления	Базисные функции
Γ_1	E''
Γ_3	$\frac{1}{2\sqrt{3}}(2L_z^2 - L_x^2 - L_y^2)$
	$\frac{1}{2}(L_x^2 - L_y^2)$
Γ_4	L_x, L_y, L_z
Γ_5	$\{L_y, L_z\}, \{L_z, L_x\}, \{L_x, L_y\}$

* В [7] для $D_1(\theta, \varphi, \psi)$ допущена описка в матричном элементе a_{13} ; правильным будет выражение

$$a_{13} = -\frac{1}{2} e^{i(\varphi - \psi)} (1 - \cos \theta),$$

Как показывают вычисления, оператор $H^{(3)}$ состоит из первых 12 слагаемых $H^{(2)}$, если в последнем сделать замену J на L и E' на E'' . Константы взаимодействия при этом, естественно, будут другими. В $H^{(2)}$, как видно из (2) и [1], содержатся также все слагаемые $H^{(1)}$ (с другими константами связи). Этот результат является следствием того, что представление $D_{j+\frac{1}{2}} \times D_{j+\frac{1}{2}}^*$ включает в себя все неприводимые представления, содержащиеся в $D_j \times D_j^*$ [3].

Выражаю глубокую благодарность С. А. Москаленко за постоянный интерес к этой работе и обсуждение результатов.

ЛИТЕРАТУРА

- И. И. Жеру, Изв. АН МССР (в печати).
- С. А. Альтшулер и Б. М. Козырев, Электронный парамагнитный резонанс, Физматгиз, 1961.
- И. И. Жеру, Метод инвариантов в сверхтонком взаимодействии (будет опубликовано).
- Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
- В. Лоу, Парамагнитный резонанс в твердых телах, Изд. ИЛ, 1962.
- В. Хейне, Теория групп в квантовой механике, Изд. ИЛ, 1963.
- Г. Я. Любарский, Теория групп и ее применение в физике, Гостехиздат, 1957.

И. И. ЖЕРУ

ИНТЕРАКЦИУНЯ СУПРАФИНА ЫН СТАРЯ ЕКСЧИТАТЭ А F-ЦЕНТРУЛУИ

Резумат

Прин метода инвариантелор се конструеште операторул дуй Гамильтон центру казул интеракциуний супрафинэ а моментелор магнетиче але электронулуй эксчитат дин F-центру ши але нуклеелор ынконжурэгоаре. Се студиязэ казуриле, кынд интеракциуня спинорбиталэ е май маре сау май микэ декыт интеракциуня супрафинэ.

К. С. КАБИСОВ, Э. П. СИНЯВСКИЙ

К ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИИ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ В ЗАДАЧЕ О БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДАХ

Многочисленные работы по теории тепловых переходов [1—4] выполнялись в так называемом „приближении Кондона“. Согласно Лэксу [4], „приближение Кондона“ заключается в пренебрежении зависимостью матричного элемента электронного перехода $\langle s | M(q) | p \rangle$ от конфигурации ядер кристаллической решетки (s, p — квантовые числа начального и конечного состояний электрона, q — совокупность ядерных координат).

Задача теории безызлучательных переходов решается в адиабатическом приближении, т. е. волновая функция системы электрон, примесной центр, кристалл ищется в виде:

$$\psi_{sn}(r, q) = \psi_s(r, q) \Phi_{sn}(q), \quad (1)$$

где электронная функция $\psi_s(r, q)$ и волновая функция $\Phi_{sn}(q)$ для медленной подсистемы удовлетворяют, соответственно, уравнениям

$$[\hat{H}(r) + V(r, q)] \psi_s(r, q) = E_s(q) \psi_s(r, q). \quad (2)$$

$$[E_s(q) + \hat{H}(q)] \Phi_{sn}(q) = \epsilon_{sn} \Phi_{sn}(q). \quad (3)$$

Здесь $\hat{H}(r), \hat{H}(q)$ — электронный и фононный гамильтонианы, $V(r, q)$ — энергия электрон-фононного взаимодействия.

При получении (2) и (3) были отброшены члены:

$$\hat{L}_{неад.} = \hat{H}(q) (\psi_s \Phi_{sn}) - \psi_s (\hat{H}(q) \Phi_{sn}), \quad (4)$$

где $\hat{L}_{неад.}$ — оператор неадиабатичности, генерирующий безызлучательные переходы.

В случае слабой электрон-фононной связи (метод Кубо—Тоёдзава [5]) член $V(r, q)$ рассматривается как малое возмущение. При сильной связи в качестве нулевых выбираются электронные функции, соответствующие минимуму потенциальной энергии равновесной конфигурации ядер q_s :

$$[\hat{H}(r) + V(r, q_s)] \psi_s^\circ(r, q_s) = E_s^\circ(q_s) \psi_s^\circ(r, q_s), \quad (5)$$

разность $V(r, q) - V(r, q_s)$ выбирается в качестве возмущения (метод Пекара—Кривоглаза [6]).

Уравнение Шредингера (2) решалось в первом приближении теории возмущений. В действительности, как будет показано ниже, такая аппроксимация для волновой функции быстрой подсистемы является недостаточной.

Во втором приближении теории возмущений для электронной волновой функции имеем [7]:

$$\begin{aligned} \psi_n(q) = & \psi_n^0(q_n) + \sum_z (q_z - q_{zn}) \sum_m' \frac{V_{zmn}(r)}{E_n^0 - E_m^0} \psi_m^0(q_m) + \\ & + \sum_z \sum_\lambda (q_z - q_{zn}) (g_\lambda - g_{\lambda n}) \sum_{m,k}'' \frac{V_{zmk}(r) V_{ikn}}{(E_n^0 - E_m^0)(E_n^0 - E_k^0)} \psi_m^0(q_m) - \\ & - \sum_{z,\lambda} (q_z - q_{zn}) (q_\lambda - q_{\lambda n}) \sum_m' \frac{V_{zmn} V_{\lambda mn}}{(E_n^0 - E_m^0)^2} \psi_m^0(q_m) - \\ & - \frac{\psi_n^0(q_n)}{2} \sum_{z,\lambda} (q_z - q_{zn}) (q_\lambda - q_{\lambda n}) \sum_m' \frac{V_{zmn} V_{\lambda mn}}{(E_n^0 - E_m^0)^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

$$V_{zmn} = \int \psi_m^{0*}(r, q_m) V_z \psi_n^0(r, q_n) d\tau; \quad V(r, q) = \sum_z V_z(q_z - q_{zn})$$

$$q_{zn} = -V_{zn}/\hbar\omega; \quad V_{zn} = \int |\psi_n^0(r, q_n)|^2 V_z d\tau. \quad (7)$$

$\psi_n^0(r, q_n)$ собственные функции уравнения (5). Штрих над суммой в (6) означает отсутствие слагаемого с $n = m$.

Вычисление вероятности безызлучательного перехода между состояниями s и p дискретного спектра примесного центра, как известно [4], сводится к определению характеристической функции $I_{sp}(t)$:

$$I_{sp}(t) = Av \left\{ \langle p | \hat{L}_{неал.}^* | s \rangle e^{\frac{i\hat{H}_p t}{\hbar}} \langle p | \hat{L}_{неал.} | s \rangle e^{-\frac{i\hat{H}_s t}{\hbar}} \right\}, \quad (8)$$

здесь символ $Av \{ \dots \}$ — означает среднее статистическое

$$Av \left\{ \dots \right\} = Sp. \left\{ \dots e^{-\frac{\hat{H}_s \beta}{\hbar}} \right\} / Sp. \left\{ e^{-\frac{\hat{H}_s \beta}{\hbar}} \right\} \quad (kT = \beta) \quad (9)$$

$$\langle p | \hat{L}_{неал.} | s \rangle = - \sum_z \hbar \omega_z \langle \psi_p | \frac{d}{dq_z} | \psi_s \rangle \frac{d}{dq_z} - \frac{1}{2} \sum_x \hbar \omega_x \langle \psi_p | \frac{d^2}{dq_x^2} | \psi_s \rangle. \quad (10)$$

Рассмотрим подробно случай сильной электрон-фононной связи (дисперсией частот нормальных колебаний пренебрегаем). После простых вычислений с учетом (6) найдем:

$$\begin{aligned} \langle p | \hat{L}_{неал.} | s \rangle = & + i \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right) \sum_\gamma' \left[\left\{ V_{\gamma ps} + \sum_z B_{zps} \hat{Q}_{zs} \right\} \hat{p}_\gamma - \right. \\ & \left. - i G_{\gamma ps} \right] + (-i\hbar\omega) \hat{\Gamma}_{ps} \end{aligned} \quad (11)$$

$$B_{zp}^\dagger = \sum_k' \frac{(V_{\gamma pk} V_{zks} + V_{zpk} V_{\gamma ps} - V_{\gamma ss} V_{zps} + V_{zss} V_{\gamma ps})}{E_s^0 - E_k^0} \quad (12)$$

$$G_{\gamma ps}^\dagger = \sum_k' \frac{V_{\gamma pk} V_{zks}}{E_s^0 - E_k^0} \frac{V_{\gamma ss} V_{zps}}{E_s^0 - E_p^0} \quad (13)$$

$$\hat{p}_\gamma = -i \frac{d}{d\hat{Q}_{\gamma s}}; \quad \hat{Q}_{\gamma s} = q_\gamma - q_{\gamma s}; \quad B_{zps}^\dagger = B_{zps}^* \quad (14)$$

Оператор $\hat{\Gamma}_{ps}$ имеет довольно громоздкий и несимметричный вид, поэтому полностью здесь выписываться не будет. Выпишем только характерную структуру одного из встречающихся слагаемых:

$$\sum_\gamma' \sum_z \sum_k'' \frac{V_{zkp}^* V_{\gamma ks}}{(E_p^0 - E_k^0)(E_s^0 - E_k^0)} \hat{Q}_{zs} \hat{p}_\gamma \quad (15)$$

Заметим, что для исследуемого $s \rightarrow p$ перехода в дискретном спектре электрона в кристалле из суммы по „ k “ в выражениях для $B_{zps}^\dagger, G_{\gamma ps}^\dagger$ учитываются только члены с $k = p$, а остальные, вследствие их малости, отбрасываются. С той же степенью точности можно не рассматривать слагаемые типа (15) (с их типичной структурой знаменателя), так как в них отсутствует резонансный член с $k = p$.

Выражение для характеристической функции $I_{sp}(t)$ примет вид:

$$\begin{aligned} I_{sp}(t) = & Av \left\{ \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right)^2 \left[\sum_{\gamma,\lambda} V_{\gamma ps}^* V_{\lambda ps} \hat{p}_\gamma e^{\frac{i\hat{H}_p t}{\hbar}} \hat{p}_\lambda e^{-\frac{i\hat{H}_s t}{\hbar}} + \right. \right. \\ & + \sum_{\gamma,\lambda} V_{\gamma ps}^* B_{zps} \hat{p}_\gamma e^{\frac{i\hat{H}_p t}{\hbar}} \hat{Q}_{zs} \hat{p}_\lambda e^{-\frac{i\hat{H}_s t}{\hbar}} + \sum_{\gamma,\lambda} V_{\gamma ps} B_{zps}^* \hat{Q}_{zs} \hat{p}_\gamma \times \\ & \left. \left. \times e^{\frac{i\hat{H}_p t}{\hbar}} \hat{p}_\lambda e^{-\frac{i\hat{H}_s t}{\hbar}} + \sum_{\gamma,\lambda} B_{zps}^* B_{zps} \hat{Q}_{zs} \hat{p}_\gamma e^{\frac{i\hat{H}_p t}{\hbar}} \hat{Q}_{zs} \hat{p}_\lambda e^{-\frac{i\hat{H}_s t}{\hbar}} \right] \right\}, \quad (16) \end{aligned}$$

где учтено, что $\sum_z V_{zps} \varphi(z)(q_{zp} - q_{zs}) = 0$ в силу свойств симметрии, если $\varphi(z)$ — сферически симметричная функция.

Легко убедиться, что слагаемые, входящие в формулу (13), содержат множитель типа:

$$Av_0 \left\{ \dots \right\} = Av \left\{ e^{\frac{i\hat{H}_p t}{\hbar}} e^{-\frac{i\hat{H}_s t}{\hbar}} \right\}, \quad \text{вычисление которого проводится известным методом Лэкса [4]. При этом в исследуемом случае сильной связи имеем:}$$

$$\frac{i}{\hbar} (\hat{H}_p - \hat{H}_s) = -i\omega \left(\varepsilon_{sp} + \sum_x \gamma_{xsp} q_{xs} \right) - i\omega \sum_x \gamma_{xsp} \hat{Q}_x \quad (17)$$

$$\hbar\omega \varepsilon_{sp} = E_s^{(0)}(q_s) - E_p^{(0)}(q_p) - \sum_x \hbar \omega (q_{xp}^2 - q_{xs}^2) \quad (18)$$

$$\hbar\omega \gamma_{xsp} = \langle s | V_x | s \rangle - \langle p | V_x | p \rangle; \quad q_{xs} = - \frac{\langle s | V_x | s \rangle}{\hbar\omega}, \quad (19)$$

где $\langle p | V_x | p \rangle = \int |\psi_p(r, q_{xp})|^2 V_x(r) d\tau$.

После громоздких, но не принципиальных вычислений выражение для характеристической функции примет вид:

$$I_{sp}(t) = \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right)^2 Av_0 \left\{ \dots \right\} \sum_{\gamma} |V_{\gamma ps}|^2 \left\{ \frac{\bar{n}}{2} e^{-i\omega t} + \frac{\bar{n}+1}{2} e^{i\omega t} + \right. \\ \left. + \eta \left[(\bar{n}+1)^2 e^{i\omega t} - (\bar{n}+1)^3 e^{2i\omega t} - \bar{n}^2 e^{-i\omega t} + \bar{n}^2 e^{-2i\omega t} \right] + \right. \\ \left. + \frac{\eta^2}{2} \left[(\bar{n}+1)^3 e^{i\omega t} - 2(\bar{n}+1)^3 e^{2i\omega t} - \bar{n}^3 e^{-i\omega t} + 2\bar{n}^3 e^{-2i\omega t} + \right. \right. \\ \left. \left. + (\bar{n}+1)^3 e^{3i\omega t} + \bar{n}^3 e^{-3i\omega t} \right] + \frac{a}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right)^2 \left[\bar{n}^2 e^{-2i\omega t} + \right. \right. \\ \left. \left. + (\bar{n}+1)^2 e^{2i\omega t} \right] \right\}, \quad (20)$$

$$\text{где } Av_0 \left\{ \dots \right\} = e^{i\omega_{ps}t} \exp. \left\{ -a(\bar{n} + 1/2) + \right. \\ \left. + \frac{ia}{2} \sin\omega t + a(\bar{n} + 1/2) \cos\omega t \right\}. \quad (21)$$

Здесь $\omega_{ps} = \frac{I_p - I_s}{\hbar}$; I_p и I_s известные в теории Пекара выражения для минимального значения потенциальной энергии ядер решетки соответственно в p и s состояниях электрона (8).

$$a = \sum_z (q_{zss} - q_{zpp})^2; \quad \eta = a \frac{\hbar\omega}{E_p^0 - E_s^0}. \quad (22)$$

При записи формулы (20) использовались соотношения

$$Av(\hat{Q}_z, \hat{p}_z) = Av(\hat{Q}_z(t), \hat{p}_z(t)) = \frac{i}{2} \\ Av(\hat{p}_z, \hat{Q}_z) = Av(\hat{p}_z(t), \hat{Q}_z(t)) = -\frac{i}{2}. \quad (23)$$

$$Av(\hat{Q}_z, \hat{Q}_z) = Av(\hat{p}_z, \hat{p}_z) = Av(\hat{Q}_z(t), \hat{Q}_z(t)) = Av(\hat{p}_z(t), \hat{p}_z(t)) = \bar{n} + 1/2$$

$$Av(\hat{Q}_z, \hat{Q}_z(t)) = Av(\hat{p}_z, \hat{p}_z(t)) = \frac{1}{2} N^+(t);$$

$$Av(\hat{p}_z, \hat{Q}_z(t)) = \frac{i}{2} N^-(t); \quad Av(\hat{Q}_z, \hat{p}_z(t)) = -\frac{i}{2} N^-(t)$$

$$N^{\pm}(t) = \bar{n} e^{-i\omega t} \pm (\bar{n}+1) e^{i\omega t}; \quad \bar{n} = \left[e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right]^{-1}. \quad (24)$$

Вероятность безызлучательного перехода $W_{sp} = \frac{1}{\hbar^2} \int d\Gamma \int I_{sp}(t) dt$ после интегрирования по переменной „ t “ запишется:

$$W_{sp} = \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right)^2 \frac{\pi}{\hbar^2 \omega} \sum_{\gamma} |v_{\gamma ps}|^2 e^{-a(\bar{n} + 1/2)} \left(1 + \frac{1}{\bar{n}} \right)^{-1/2} \left\{ a \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right)^2 \left[I_{l-2}(z) - \right. \right. \\ \left. \left. - I_{l+2}(z) \right] \bar{n}(\bar{n}+1) + \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)} \left[I_{l-1}(z) + I_{l+1}(z) \right] + \right. \\ \left. + 2\eta \left[(\bar{n}+1) \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)} I_{l+1}(z) - \bar{n} \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)} I_{l-1}(z) + \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{n}(\bar{n}+1) (I_{l-2}(z) - I_{l+2}(z)) \right] + \eta^2 \left[(\bar{n}+1)^2 \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)} I_{l+1}(z) - \right. \right. \\ \left. \left. - \bar{n}^2 \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)} I_{l-1}(z) - 2(\bar{n}+1)^2 \bar{n} I_{l+2}(z) + 2\bar{n}^2 (\bar{n}+1) I_{l-2}(z) + \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{n}(\bar{n}+1) \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)} (I_{l+3}(z) + I_{l-3}(z)) \right] \right\}, \quad (25)$$

здесь $z = a \sqrt{\bar{n}(\bar{n}+1)}$; $I_l(z)$ — функция Бесселя мнимого аргумента; $l = \frac{\omega_{sp}}{\omega}$.

Первым членом в формуле (25) пренебрегаем, т. к. он значительно меньше остальных слагаемых $\left(\frac{a(\hbar\omega)^2}{E_s^0 - E_p^0} \ll 1 \right)$. Выражение для W_{sp} не содержит неизвестных параметров и справедливо для любого интервала температур. Поскольку, однако, температурная зависимость W_{sp} носит довольно сложный характер, рассмотрим два предельных случая:

а) случай низких температур: $z \ll 1$, $\bar{n} \ll 1$; $I_l(z) \approx \frac{(z/2)^l}{l!}$

$$W_{sp} = \frac{\pi}{\hbar^2 \omega} \left(\frac{\hbar\omega}{E_s^0 - E_p^0} \right)^2 \sum_{\gamma} |v_{\gamma ps}|^2 e^{-a(\bar{n} + 1/2)} \left(1 + \frac{1}{\bar{n}} \right)^{-1/2} \frac{1}{\bar{n}^{l/2}} \left(\frac{a}{2} \right)^{l(l-1)} \times \\ \times \frac{1}{(l-1)!} \left\{ 1 + \frac{4(|l|-1)}{l_1} + \frac{4(|l|-1)(|l|-2)}{l_1^2} \right\}, \quad (26)$$

здесь $l_1 = \frac{\hbar\omega}{E_p^0 - E_s^0}$ знаки плюс и минус относятся, соответственно, к рекомбинационному и ионизационному процессам;

б) случай высоких температур: $z \gg 1$; $\frac{l}{z} \ll 1$; $I_l \approx \frac{e^{-z}}{\sqrt{2\pi z}}$

$$\bar{n} \approx \frac{kT}{\hbar\omega}$$

$$W_{sp} = \frac{1}{l_1^2 \hbar^2 \omega} \sqrt{\frac{2\pi kT}{\hbar\omega}} \sum_{\gamma} |v_{\gamma ps}|^2 e^{-\frac{|l| \hbar\omega}{2kT}} \left(1 + \frac{|l|}{a} \right) \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{2l}{l_1} + \left(\frac{kTa}{\hbar\omega} \right)^2 \right\} \quad (27)$$

(учтено, что $ch\left(\frac{l\hbar\omega}{akT}\right) \sim 1$; $sh\left(\frac{l\hbar\omega}{akT}\right) \sim 0$).

Таким образом, видно, что учет электронной волновой функции во втором приближении теории возмущения (6) не обеспечивает быстрой сходимости ряда $\left(\frac{l}{l_1} \sim 1 \right)$ и, следовательно, ее выбор в ранее рассматриваемых задачах тепловых переходов является не корректным.

Возникает необходимость учета полного ряда теории возмущений для волновой функции быстрой подсистемы.

В работе [9] получены адиабатические функции локализованного электрона в виде свернутого ряда по ядерным переменным

$$\psi_s(r, q) = \left\{ 1 + \varepsilon^2 \sum_n' \frac{| \langle n | v | s \rangle |^2 }{ [E_s(q) - E_n^0(q) - \delta \langle n | v | n \rangle]^2} \right\}^{-1/2} \left[\psi_s^0 + \sum_n' \frac{\langle n | v | s \rangle \psi_n^0(r, q_s)}{E_s(q) - E_n(q) - \delta \langle n | v | n \rangle} \right] \quad (28)$$

параметр ε введен для удобства,

где δ — формальный индекс, впоследствии полагаемый единице. Очевидно, что при $\delta = 0$ свернутая электронная волновая функция соответствует обычной постановке задачи теории безызлучательных переходов.

С учетом (28) была вычислена вероятность теплового перехода для случая низких температур:

$$W_{1s \rightarrow 2p} = \frac{\pi}{h^2 \omega} e^{-a(\bar{n} + 1/2)} \sqrt{\bar{n}(\bar{n} + 1)} \left(1 + \frac{1}{\bar{n}} \right)^{-1/2} \sum_n' |v_{nps}|^2 \times \\ \times \{ (l-1)(l+0,5) (\theta_{l, l-2}^+)^2 + \left(\frac{a}{2} \theta_{l, l-1}^+ + \theta_{0, l-1}^- \right)^2 - \\ - a(l-1) \theta_{l, l-2}^+ \theta_{l, l-1}^- - 2(l-1) \theta_{l, l-2}^+ \theta_{0, l-2}^- \} \quad (29)$$

$$\theta_{n, l \pm \nu}^\pm = \int_0^\infty e^{-\frac{a^2}{4} \delta \tau^2} \tau^n [e^{i l \tau} (1 - i \delta \tau)^{l \pm \nu} \mp e^{-i l \tau} (1 + i \delta \tau)^{l \pm \nu}] d\tau. \quad (30)$$

Естественно, что спецфункции $\theta_{0, l \pm \nu}^\pm$ при $\delta = 0$ равны $1/l!$ и формула (29) переходит в известное выражение, исследованное рядом авторов [1-4].

Однако, как легко убедиться, ни при каких значениях параметров перехода ($\delta \equiv 1$) „некондоновское приближение“ никогда не переходит в ранее применявшееся в теории многофононных переходов „приближение Кондона“.

В заключение авторы выражают искреннюю признательность В. А. Коварскому за предложенную тему и обсуждение ряда затронутых вопросов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. А. Кривоглаз, ЖЭТФ, 25, 191 (1953).
2. К. Нгуанг, A. Phys. Proc. Roy. Soc. A 204, 406 (1950) (см. пер. в сб. ПФП, ИИЛ, 1957).
3. Ю. Е. Перлин, М. М. Шаранд, Ученые зап. Кншиневского госуниверситета, 24, 41 (1956).
4. М. Лак, Journ. Chem. Phys., 20, 1752 (1952) (см. пер. в сб. ПФП, ИИЛ, 1957).
5. R. Kubo, I. Toyazawa, Pr. Theor. Phys. 13, 160 (1955) (см. пер. в сб. ПФП, ИИЛ, 1957).
6. Н. А. Кривоглаз, С. И. Пекар, Тр. инст. физики АН УССР, вып. 4 (1953).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Госиздат, 1963.
8. С. И. Пекар, Исследования по электронной теории кристаллов, ГИИТЛ, 1951.
9. В. А. Коварский, ФТТ 4, 1636 (1962).

К. С. КАБИСОВ, Э. П. СИНЯВСКИЙ

КУ ПРИВИРЕ ЛА ТЕОРИЯ ПЕРТУРБАЦИЛОР ПЕНТРУ ФУНКЦИЯ УНДУЛАРЭ ЕЛЕКТРОНИКЭ ҮН ПРОБЛЕМА ТРАНЗИЦИЛОР ФЭРЭ ИРАДИЕРЕ

Резумат

Се черчетяз апроксимация а доу а теорией пертурбацилор-пентру функция ундуларэ ын проблема транзицилор фэрэ ирадиере. Се аратэ кэ еа ну есте микэ ши деч ла дезлегаря проблемей апроксимация луй Кондон ну е коректэ.

ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК МОЛДАВСКОЙ ССР

Физико-математический институт Академии наук Молдавской ССР
 А. Н. КАСИЯН, Д. З. КОН

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ АДИАБАТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ II

В предыдущей работе [1] нами было получено общее выражение для термодинамического потенциала системы N электронов, взаимодействующих между собой по кулоновскому закону, а также с оптическими фононами в ионных кристаллах. При этом считалось, что электронно-фононное взаимодействие является сильным, и поэтому его нельзя учитывать по теории возмущений [2].

Полученное в [1] выражение для термодинамического потенциала ψ системы можно представить в виде:

$$\psi = \sum_q \bar{\omega}_q |c_q|^2 - \beta^{-1} u' + \beta^{-1} \sum_{\alpha_n} Sp \left\{ e^{i\omega_n \alpha_n} \ln G(\alpha_n) - G(\alpha_n) M(\alpha_n) \right\} - \frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_n} Sp \left\{ e^{i\omega_n} \ln B(\omega_n) - B(\omega_n) \Pi(\omega_n) - \ln (B_o(\omega_n) D_o^{-1}(\omega_n)) \right\}, \quad (1)$$

где u' — сумма вкладов от всех замкнутых связных скелетных диаграмм, линиям которых ставится в соответствии полные функции Грина, электрона G и бозонного поля B (M и Π — соответственно массовый и поляризованный операторы), причем каждая диаграмма содержит множитель $1/n$ (n — число вершин скелетной диаграммы).

Величины G и B (а также M и Π) являются матрицами, определяемыми матричными элементами:

$$\begin{aligned} (G)_{rr'} &= G(r, r'), & (G_o)_{rr'} &= G_o(r) \delta_{rr'} \\ (B)_{qq'} &= B(q, q'), & (B_o)_{qq'} &= B_o(q) \delta_{qq'}. \end{aligned} \quad (2)$$

Знак Sp означает шпур по этим матричным индексам. Через r мы обозначаем совокупность спинного квантового числа σ и квантового числа v (см. [1] (13)).

В работе [1] было также показано, что выражение [1] для термодинамического потенциала обладает важными свойствами стационарности относительно вариации величин G , B , M , Π и c_q . Было установлено также, что электронная функция Грина G стационарна относительно вариации c_q , а для бозонной функции B имеет место соотношение:

$$\frac{\delta B(p, p'; \omega_n)}{\delta c_q} = -\beta V A_q \delta_{\omega_n, 0} [A_{\sigma'} (c_{p'} + c_{-p'}^*) \delta_{\sigma', q} + A_p (c_p + c_{-p}^*) \delta_{p', q}]. \quad (3)$$

Все эти свойства значительно облегчают обращение с выражением (1).

В данной работе на основе (1) мы рассмотрим такие свойства системы, как эффективную массу, теплоемкость, магнитную восприимчивость. При этом мы ограничимся лишь указанием пути расчета указанных величин и получением для них довольно общих формул, которые могли бы служить основой для дальнейших приближенных вычислений. К сожалению, из-за весьма сложного уравнения для определения спектра элементарных возбуждений в системе выполнение конкретных вычислений на основе этих формул в настоящее время является чрезвычайно сложной задачей, поэтому вопрос о сравнении теории с экспериментом в данной работе не ставится. Наша цель состоит в обобщении теории адиабатического приближения на случай многих электронов и отличных от нуля температур, а также в выявлении таких свойств рассматриваемой модели, которые можно было бы установить на основе общей теории.

Заметим, что близкие вопросы рассматривались в работах Латтинжера [3, 4] для вырожденной ферми-системы. Однако все результаты Латтинжера получены в предположении, что взаимодействие между фермионами является таким, что ряды теории возмущений по этому взаимодействию хорошо описывают свойства системы. В нашем случае это заведомо не так, в связи с чем часть взаимодействия учитывается в нулевом приближении и только другая, оставшаяся часть, — как малое возмущение. Это обстоятельство существенно затрудняет построение теории таких систем.

1. Электронная подсистема в нулевом приближении

Рассмотрим опять точное выражение (1) для термодинамического потенциала и положим в нем параметр малости адиабатической теории возмущений β равным нулю. Это означает, что все линии взаимодействия в диаграммах (а следовательно, и массовый и поляризованный операторы) происходят только от кулоновского взаимодействия. Оставшееся выражение, однако, все еще является весьма сложным. Учтем кулоновское взаимодействие в простейшем приближении — приближении Хартри. Для термодинамического потенциала мы тогда получим (Приложение):

$$\psi_0 = \sum_q \bar{\omega}_q c_q^* c_q - \frac{1}{\beta} \sum_{v, \sigma} \ln (1 + e^{-\beta \bar{E}_v}), \quad (4)$$

$$c_q = \left(-\frac{A_q}{\omega_q} + \frac{v(q)}{2VA_q} \right) \langle \rho - q \rangle, \quad v(q) = \frac{4\pi e^2}{n^2 q^2}, \quad (5)$$

где \bar{E}_v — собственное значение «эквивалентного волнового уравнения»:

$$\bar{T}_k u_{kv} + \sum_q A_q (\tilde{c}_q + \tilde{c}_q^*) u_{k-q, v} = \bar{E}_v u_{kv}. \quad (6)$$

Величины \bar{E}_v играют роль энергий новых фермиевских возбуждений в системе и зависят от температуры, плотности частиц и скорости трансляционного движения. Задача определения спектра \bar{E}_v является довольно сложной задачей, поскольку уравнение (6) — это уравнение самосогласованного поля. В случае $N=1$ (полярон) и абсолютного нуля температуры уравнение такого типа исследовалось Пекаром [5] при помощи вариационного метода. Было установлено, что первые несколь-

ко нижайших состояний электрона в эффективном самосогласованном поле (имеющего характер притяжения) являются дискретными энергетическими уровнями. В нашем случае, однако, учет кулоновского взаимодействия в простейшем приближении (приближении Хартри) существенно меняет эффективное поле (оно приобретает характер отталкивания). На основании общего свойства такого движения [6] мы можем сделать заключение, что спектр электрона будет квазинепрерывным.

При малых скоростях v , ограничиваясь членами, квадратичными по v , мы можем написать:

$$\tilde{E}_v(v) \approx \tilde{E}_v(0) + (\partial \tilde{E}_v / \partial v) v + \frac{1}{2} (\partial^2 \tilde{E}_v / \partial v^2) v^2. \quad (7)$$

С другой стороны, продифференцировав уравнения (6) по v , получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{T}_k}{\partial v} u_{k\nu} + \sum_q A_q \frac{\partial (\tilde{c}_q + \tilde{c}_q^*)}{\partial v} u_{k-q\nu} - \frac{\partial \tilde{E}_v}{\partial v} u_{k\nu} + \\ + \tilde{T}_k \frac{\partial u_{k\nu}}{\partial v} + \sum_q A_q (\tilde{c}_q + \tilde{c}_q^*) \frac{\partial u_{k-q\nu}}{\partial v} - \tilde{E}_v \frac{\partial u_{k\nu}}{\partial v} = 0, \end{aligned}$$

откуда следует

$$\frac{\partial \tilde{E}_v}{\partial v} = \frac{\sum \partial \tilde{T}_k}{\kappa} |u_{k\nu}|^2 + \sum_{q\kappa} A_q \frac{\partial (\tilde{c}_q + \tilde{c}_q^*)}{\partial v} u_{k\nu}^* u_{k-q\nu}. \quad (8)$$

Аналогично вычисляется и вторая производная $\partial^2 \tilde{E}_v / \partial v^2$, после чего выражение (7) можно переписать в виде:

$$\tilde{E}_v(v) = \tilde{E}_v(0) - \mu_v^* v^2, \quad (9)$$

где

$$\mu_v^* = \frac{2}{3} \sum_{\kappa q} q^2 \frac{A_q^2}{\omega_q^2} \langle \rho_{-q} \rangle u_{k\nu}^* u_{k-q\nu}. \quad (10)$$

Величина μ_v^* имеет смысл эффективной массы элементарного возбуждения μ , как видно из (10), зависит от состояния ν последнего.

Выражение (4) позволяет определить характеристики электронной подсистемы в данном приближении.

Получим прежде всего выражение для полного импульса. Производя для удобства дальнейших вычислений замену $\varepsilon^2 P = J$, будем иметь:

$$J_0 = -\frac{\partial \psi_0}{\partial v} = -\sum_q q |c_q|^2 - \sum_q \frac{A_q^2}{\omega_q} \frac{\partial}{\partial v} |\langle \rho_{-q} \rangle|^2 - \sum_{\nu} n_{\nu} \frac{\partial \tilde{E}_v}{\partial v}, \quad (11)$$

где введено обозначение

$$n_{\nu} = (\exp \beta \tilde{E}_v + 1)^{-1}. \quad (12)$$

С учетом (8) это соотношение приводится к виду:

$$J_0 = \sum_q q |c_q|^2, \quad (13)$$

при этом оказывается, что выражение (4) для термодинамического потенциала ψ_0 стационарно относительно вариации $\langle \rho_q \rangle$, т. е.

$$\delta \psi_0 / \delta \langle \rho_q \rangle = 0. \quad (14)$$

Теперь мы можем перейти к определению эффективной массы движения всех электронов как целое:

$$\mu^* = \frac{1}{3} \left(\frac{\partial J_0}{\partial v} \right)_{v=0} = \frac{2}{3} \sum_q q^2 \frac{A_q^2}{\omega_q^2} |\langle \rho_q \rangle|^2. \quad (15)$$

Нетрудно заметить, что имеет место соотношение:

$$\mu^* = \sum_{\nu} n_{\nu} \mu_{\nu}^*, \quad (16)$$

а при $N=1$ и $T=0$ справедливо равенство $\mu^* = \mu_{\nu_0}^*$ (ν_0 — означает основное состояние) и обе эти величины совпадают с соответствующими формулами работ [7, 8] по адиабатической теории возмущений.

Используя (4) и (14), мы находим далее функцию распределения электронов по импульсам n_k^*

$$n_k^* = \frac{\partial \psi_0}{\partial T_k} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\nu} |u_{k\nu}|^2 G_0(\nu, \Omega_n) = \sum_{\nu} |u_{k\nu}|^2 n_{\nu}, \quad (17)$$

где n_{ν} определяется согласно (12).

Для вычисления теплоемкости C_v воспользуемся термодинамическими соотношениями

$$C_v = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_v; \quad S = - \left(\frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{\lambda, v}, \quad (18)$$

где S — энтропия, λ — химический потенциал. На основании (4) и свойства стационарности (14) нетрудно получить:

$$S = -2k \sum_{\nu} \left[(1-n_{\nu}) \ln(1-n_{\nu}) + n_{\nu} \ln n_{\nu} \right]. \quad (19)$$

По формуле это выражение совпадает с энтропией идеального газа элементарных возбуждений. Заметим, однако, что такая простая формула имеет место только относительно функции распределений n_{ν} , а не относительно n_k . Соотношение (19) эквивалентно следующему выражению:

$$S = \frac{\partial}{\partial T} \left[kT \sum_{\nu} \ln(1 + e^{-\tilde{E}_v/kT}) \right]_{\tilde{E}_v}, \quad (20)$$

При дифференцировании в (20) по T мы уже не должны учитывать неявную зависимость величин \tilde{E}_v от температуры.

Для теплоемкости получаем:

$$C_v = T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[kT \sum_{\nu} \ln(1 + e^{-\tilde{E}_v/kT}) \right]_{\tilde{E}_v} - \sum_{\nu} \left(\frac{\partial n_{\nu}}{\partial T} \right)_{\tilde{E}_v} \frac{\partial \tilde{E}_v}{\partial T}. \quad (21)$$

Второе слагаемое в этом выражении произошло от учета неявной зависимости энергии элементарных возбуждений \tilde{E}_v от температуры. При малых значениях v , ограничиваясь членами порядка v^2 , можно формулы (19) и (21) записать в виде

$$S = -2k \sum_{\nu} \left[(1-n_{\nu}) \ln(1-n_{\nu}) + n_{\nu} \ln n_{\nu} \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mu^*}{\partial T} \right)_{\lambda, v} v^2; \quad (22)$$

$$C_V = T \left\{ \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[kT \sum_{\nu} \ln(1 + e^{-\tilde{E}_{\nu}/kT}) \right]_{E_{\nu}} - \sum_{\nu} \left(\frac{\partial n_{\nu}}{\partial T} \right) \frac{\partial \tilde{E}_{\nu}}{E_{\nu} \partial T} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \mu^*}{\partial T^2} \right)_{\nu} \tilde{v}_{\nu}^2 \right\} \quad (23)$$

При этом все величины, входящие в (22) и (23), следует брать при $v=0$.

Из (21) и (23) видно, что к обычному члену в теплоемкости (линейного по T в случае низких температур) добавляются члены, происходящие от учета неявной зависимости энергии элементарных возбуждений и их эффективной массы от температуры. К сожалению, из-за сложности спектра E_{ν} нам не удалось здесь установить, какова зависимость от T этих членов при низких температурах и насколько они существенны вообще. Заметим лишь, что, как показал В. Л. Бонч-Бруевич [7], независимо от спектра, электронная теплоемкость при низких температурах должна зависеть линейно от T .

В заключение этого параграфа заметим, что аналогичные расчеты можно выполнить и на основе точного выражения для термодинамического потенциала ψ . При этом, однако, формулы получаются значительно более громоздкими и поэтому менее наглядными.

Для полного импульса I в этом случае имеем

$$I = - \frac{\partial \psi}{\partial v} = \sum_q q |c_q|^2 + \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_n} Sp \left\{ G(\Omega_n) \left(\frac{\partial G_{\nu}^{-1}}{\partial v} \right) c_q \right\} - \frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_n} Sp \left\{ B(\omega_n) \frac{\partial B_{\nu}^{-1}(\omega_n)}{\partial v} - B_{\nu}(\omega_n) \frac{\partial B_{\nu}^{-1}(\omega_n)}{\partial v} + D_{\nu}(\omega_n) \frac{\partial D_{\nu}^{-1}(\omega_n)}{\partial v} \right\} \quad (24)$$

Последнее слагаемое в (24) можно упростить, если воспользоваться уравнениями Дайсона для функций B и D . В результате получаем:

$$I = \sum_q q |c_q|^2 + \frac{2\varepsilon^2}{\beta} \sum_{k\nu_n} k u_{k\nu} G(\nu_n; \Omega_n) + \varepsilon^2 (4\pi e^2 c \omega^2 \beta)^{-1} \sum_{q\omega_n} q^3 (vq + i\omega_n) D(q, -q; \omega_n). \quad (25)$$

Из (25) можно определить эффективную массу μ^* движения системы, как целого

$$\mu^* = (1/3) \partial I / \partial v. \quad (26)$$

При этом необходимо иметь в виду, что I , вообще говоря, зависит от v сложным образом через c_q и функции G и D , которые сами зависят от c_q . Однако нетрудно убедиться, что выражение (25) стационарно относительно вариации c_q , в результате чего формула (26) раскрывается без особого труда, и мы получаем:

$$\mu^* = \beta \left\{ \varepsilon^4 \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} f_{\nu'\nu} G^2(\nu\sigma, \mu'\sigma'; \mu'\sigma'\tau^+, \mu\sigma\tau) - \varepsilon^3 \sum_{qq'} q f_{\nu\nu'} W(\nu\sigma\tau, \mu\sigma\tau^+ | q\tau) + \varepsilon^3 (2\omega_0)^{-1} \sum_{qq'} q q' \left(\frac{d}{d\tau} + vq' \right) \cdot R(q'o, -q'\tau | qo) + \varepsilon^4 \omega_0^{-1} \sum_{\sigma q} \sum_{\nu\mu} q f_{\nu\nu'} \left(\frac{d}{d\tau} + vq \right) K(\nu\sigma\tau, \mu\sigma\tau^+; qo, -q\tau) + \varepsilon^4 (4\omega_0^2)^{-1} \sum_{qq'} q q' \left(\frac{d}{d\tau} + vq \right) \left(\frac{d}{d\tau} + vq' \right) D_2(qo, -q\tau; q'o, -q'\tau) \right\} \quad (27)$$

где введены двухчастичные функции Грина: $G_{\nu}^{-1} \left\langle T x_{\nu}(\tau) x_{\nu'}(\tau') \right\rangle$ — электронная, $D_{\nu}^{-1} \left\langle T \varphi_q(o) \varphi_{-q}(\tau) \varphi_q(o) \varphi_{-q}(\tau) \right\rangle$ — фононная и $K \rightarrow \left\langle T x_{\nu}(\tau) x_{\nu'}(\tau') \varphi_q(o) \varphi_{-q}(\tau') \right\rangle$ — смешанная электронно-фононная, а также функции:

$$W \rightarrow \left\langle T x_{\nu}(\tau) x_{\nu'}(\tau') (c_q^* \beta_q + c_q \beta_q^+) \right\rangle$$

$$R \rightarrow \left\langle T \varphi_q(o) \varphi_{-q}(\tau) (c_q^* \beta_q + c_q \beta_q^+) \right\rangle, \quad f_{\nu\nu'} = \sum_k k u_{k\nu} u_{k\nu'}. \quad (28)$$

В нулевом приближении по взаимодействию и при $T=0$ из (27) получаем

$$\mu^* = (2/3) \beta \varepsilon^4 \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} f_{\nu'\nu} (1 - n_{\nu}). \quad (29)$$

В отсутствие взаимодействия ($c_q = 0$) эта формула дает очень простой результат

$$\mu^* = mN; \quad (30)$$

где m — масса электрона.

2. Спиновый парамагнетизм

Рассмотрим теперь вычисление спиновой парамагнитной восприимчивости. С этой целью добавим в нулевой гамильтониан взаимодействие магнитных моментов электронов с внешним магнитным полем. Строго говоря, магнитное поле воздействует и на орбитальное движение электронов тоже. Однако ради простоты мы будем пренебрегать этим взаимодействием.

Пусть магнитное поле H направлено вдоль oz и ось квантования спинов выбрана в этом же направлении. Это означает, что фигурирующая ранее величина \bar{T}_k теперь заменяется на $\mu_B H \sigma$ (μ_B — магнетон Бора). От магнитного поля теперь будут зависеть собственные значения \tilde{E} , и собственные функции $u_{k\nu}$ эффективного волнового уравнения (6), а также величины c_q и c_q' .

Чтобы вычислить магнитную восприимчивость необходимо сначала найти средний магнитный момент M системы. На основе (1) имеем:

$$M = - \partial \psi(k, V, T, H) / \partial H. \quad (31)$$

Учитывая принцип стационарности термодинамического потенциала относительно вариации величин c_q , $M(\Omega_n)$ и $\Pi(\omega_n)$, мы должны дифференцировать в (31) только по явно входящему H . Это сводится к дифференцированию только члена с $\ln G$, и мы получаем:

$$M = - \mu_B \beta^{-1} \sum_{r\nu_n} \sigma G(r\nu; \Omega_n). \quad (32)$$

Далее, в силу свойства стационарности G относительно вариации c_q , нетрудно получить следующее выражение для спиновой магнитной восприимчивости χ :

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \beta \mu_B^2 \sum_{rr'} \sigma \sigma' G_2(r\nu, r'\nu'; r'\nu^+, r\nu^+). \quad (33)$$

где

$$G_2(r\tau, r'\tau', r'\tau'+, r\tau+) = \langle T(a_r(\tau)a_{r'}(\tau') a_r^+(\tau'+) a_r^+(\tau+)) \rangle$$

— двухчастичная функция Грина при определенном выборе „временных аргументов“ и при $H=0$.

В нулевом приближении по взаимодействию получаем

$$z = 2\beta\mu_B^2 \sum n_\nu (1 - n_\nu), \quad (34)$$

где n_ν определяется согласно (12), т. е. формально выражение (34) можно получить из соответствующей формулы для случая невзаимодействующих электронов, если заменить в последней функцию распределения электронов по импульсам на функцию распределения для элементарных возбуждений.

3. Бозе-спектр элементарных возбуждений

Рассмотрим уравнение для функции B , определяющее свойства элементарных возбуждений бозе-типа. С этой целью воспользуемся простейшим приближением для поляризационного оператора (диаграмма второго порядка, состоящая из одной электронной петли) и напомним:

$$\Pi^{(2)}(x, x') = 2G_0(x, x') G_0(x', x), \quad x \equiv (\vec{x}, \tau). \quad (35)$$

Принимая во внимание явный вид функции G_0

$$G_0(\vec{x}, x'/\Omega_n) = \sum_\nu \theta_\nu(\vec{x}) \theta_\nu^*(\vec{x}') (\bar{E}_\nu - i\Omega_n)^{-1}, \quad (36)$$

где

$$\theta_\nu(\vec{x}) = V^{-1/2} \sum_k u_{k\nu} e^{ik\vec{x}}$$

координатное представление функций $u_{k\nu}$, и произведя на этой основе некоторые преобразование в (35), мы получим:

$$\Pi^{(2)}(\vec{x}, \vec{x}' | \omega_n) = -2\sum_{\nu\mu} \theta_\nu^*(\vec{x}) \theta_\nu^*(\vec{x}') \theta_\mu(\vec{x}') \theta_\mu(\vec{x}) \frac{n_\mu - n_\nu}{E_\mu - E_\nu + i\omega_n}. \quad (37)$$

Как известно, спектр элементарных возбуждений определяется полюсами запаздывающих или опережающих функций Грина. Поэтому продолжим выражение (37) с дискретных точек ω_n на всю комплексную плоскость $z = i\omega_n$.

Уравнение для запаздывающей или опережающей функции Грина принимает вид:

$$\int dx_1 \left[B_0^{-1}(x, x_1 | z) - \Pi^{(2)}(x, x_1 | z) \right] B(x_1, x' | z) = \delta(x - x'). \quad (38)$$

Ренормированные частоты бозонного поля определяются собственными значениями однородного уравнения

$$B_0^{-1}(q | z) a_z(q) - V^{-1} \sum_{q'} \Pi^{(2)}(q, q' | z) a_z(q') = 0, \quad (39)$$

соответствующего уравнению (38).

Подставляя сюда выражение для B_0

$$B_0(q, z) = VA_q^2 \left[(\bar{\omega}_{-q} + z)^{-1} + (\bar{\omega}_q - z)^{-1} \right] - v(q), \quad (40)$$

уравнение (39) приводится к виду:

$$\frac{\omega_0^2 - (vq+z)^2}{\omega_0^2 - \epsilon_0 n^{-2}(vq+z)^2} a_z(q) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_0 q^2 V q'} \sum \Pi^{(2)}(q, q' | z) a_z(q') = 0. \quad (41)$$

Заметим, что если пренебречь кулоновским взаимодействием между электронами, то, как и следовало ожидать, уравнение совпадает с соответствующим уравнением Тябликова при $v=0$ (уравнение (7.2) из [2] для ренормированных частот фононного поля.

Наоборот, если в гамильтониане оставить одно лишь кулоновское взаимодействие и пренебречь электронно-фононным взаимодействием, то, учитывая, что в этом случае

$$u_{k\nu} = \delta_{k\nu}; \quad E_\nu = T_\nu, \quad (42)$$

мы получаем:

$$\Pi(q, q', z) = -\delta_{q,q'} \sum_k \frac{n_{k-q} - n_k}{T_{k-q} - T_{k+z}}, \quad (43)$$

и уравнение (41) переходит в известное уравнение для частот плазменных колебаний [10]

$$1 - \frac{v(q)}{V} \sum_k \frac{n_{k-q} - n_k}{T_{k-q} - T_{k+z}} = 0, \quad (44)$$

в приближении случайных фаз.

В общем случае, при наличии как электронно-фононного, так и кулоновского взаимодействий, фононные и плазменные колебания перепутываются и мы получаем новую ветвь коллективных возбуждений бозе-типа.

Авторы благодарны В. А. Москаленко за руководство, а также В. Л. Бонч-Бруевичу и С. В. Тябликову за обсуждение работы и ценные замечания.

Приложение

Рассмотрим вклад в массовый оператор $M(\nu\mu; \Omega_n)$, происходящий от простейшей собственно-энергетической диаграммы, содержащей только одну самозамыкающуюся электронную петлю и одну линию взаимодействия. Обозначив это выражение через $M^{(1)}(\nu\mu; \Omega_n)$, будем иметь:

$$M^{(1)}(\nu\mu; \Omega_n) = -V^{-1} \sum_{kq} u_{k\nu}^* u_{k-q\mu} v(q) \langle \rho_{-q} \rangle. \quad (I)$$

Отсюда видно, что в этом приближении массовый оператор $M^{(1)}$ фактически не зависит от Ω_n . Возможно так выбирать функции $u_{k\nu}$, чтобы диагонализировать выражение

$$(E - M^{(1)})_{\nu\mu} = \bar{E}_\nu \delta_{\nu\mu}. \quad (II)$$

Тогда будем иметь:

$$(III) \quad G(\nu_n; \Omega_n) = (\tilde{E}_\nu - i\Omega_n)^{-1} \delta_{\nu n} \equiv G(\nu; \Omega_n).$$

Условие диагонализации (II) означает, что

$$(IV) \quad \sum_k \bar{T}_k u_{k\nu}^* u_{k\nu} + \sum_{kq} A_q (c_q + c_{-q}^*) u_{k\nu}^* u_{k-q\nu} + V^{-1} \sum_{kq} v(q) \langle \rho_{-q} \rangle u_{k\nu}^* u_{k-q\nu} = \tilde{E}_\nu \delta_{\nu n},$$

откуда следует уравнение (6) для определения величин E_ν .

Выражение для ψ в данном приближении получим, если представим в (1) приближенные выражения для функции Грина (III) и массового оператора (I), а для u' учтем простейшую диаграмму с двумя самозамыкающимися электронными петлями. В результате получаем:

$$(VI) \quad \psi_0 = \sum_q \bar{\omega}_q |c_q|^2 + 2\beta^{-1} \sum_{\nu n} \ln(\tilde{E}_\nu - i\Omega_n) + (\beta V)^{-1} \sum_{\nu n} (\tilde{E}_\nu - i\Omega_n)^{-1} \cdot \sum_{kq} u_{k\nu}^* u_{k-q\nu} v(q) \langle \rho_{-q} \rangle + (2V)^{-1} \sum_q v(q) | \langle \rho_q \rangle |^2.$$

Вычисляя суммы по частотам приемом, указанным в [3, 4], после некоторых преобразований мы приходим к выражению (4).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Касиян, Л. З. Кон, Изв. АН МССР, 1963 (в печати).
2. С. В. Тябликова, ФТТ, 3, 3445 (1961).
3. I. M. Luttinger, Phys. Rev., 119, 1153 (1960).
4. I. M. Luttinger, I. C. Ward, Phys. Rev., 118, 1417 (1960).
5. С. И. Пекар, Исследование по электронной теории кристаллов, Гостехиздат, М.—Л., 1951.
6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.
7. Н. Н. Боголюбов, Укр. матем. журн., 2, 3 (1950).
8. С. В. Тябликов, ЖЭТФ, 21, 377 (1951).
9. В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, «Метод функций Грина в статистической механике», Москва, 1961.
10. Д. Пайнс, Проблема многих тел, ИЛ, М., 1963.

А. И. КАСИЯН, Л. З. КОН

А. И. КАСИЯН, Л. З. КОН

УНЕЛЕ БИТРЕБЭРЬ АЛЕ ТЕОРИИ АДИБАТИЧЕ А ПЕРТУРБАЦИИЛОР

Резюме

Се кондере ун систем, алкэунт дин мулць електронь, ын интеракциуне ынтре ей ши ку осцилациле оптиче але рещелей ын кристалеле иониче. Пе база експресней пентру потенциалул термодинамик ал системулуй, дедус ын [1], с'ау обцинут експресий женерале пентру маса ефективэ а електронилор, капачитатя термикэ ши сусцептибилитатя магнетикэ. С'а обцинут ла фел о екуацие пентру спектрул ексцитациилор коллективе де типул Бозе, каре ын казуриле-лимитэ кореспунзэтоаре трече сау ын куноскута екуацие алуй Тябликов пентру фреквенцеле ренормате але фоноилор, сау ын екуация пентру осцилациле плазмиче ын апроксимация фазелор хаотиче.

В данной работе рассматривается система из нескольких электронов, взаимодействующих друг с другом и с ионной решеткой кристалла. На основе экспрессии для потенциала термодинамической системы, полученной в [1], получены общие выражения для эффективной массы электронов, температурной и магнитной восприимчивости. Также получены уравнения для спектров возбуждений коллективного типа типа Бозе, которые в пределе соответствуют уравнению Тябликова для частоты плазмы, а также уравнению для частоты плазмы в хаотической фазе.

В. А. КОВАРСКИЙ, Е. В. ВИТИУ

К ТЕОРИИ ГЕНЕРАЦИОННО-РЕКОМБИНАЦИОННЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

§ 1. Постановка задачи

Флуктуации плотности заряженных частиц, связанные с процессами рекомбинации и генерации играют важную роль в физической кинетике. В частности, в теории полупроводников тщательно исследован так называемый генерационно-рекомбинационный шум, определяющий спонтанные флуктуации тока и напряжения в полупроводниковых приборах и материалах.

Спектральная плотность интенсивности флуктуаций, связанных с процессами рекомбинации и рассеяния носителей тока для широкого класса полупроводников описывается эмпирической формулой вида^[1]:

$$A + \frac{B}{\omega\alpha} + \frac{C}{\omega^2 + a^2}$$

$1 \leq \alpha < 2$, A , B , C , a — постоянные, ω — частота шума.

В зависимости от условий эксперимента может проявиться та или иная часть спектра. Первый член относится к тепловому шуму с «белым» спектром и хорошо известен^[2]. Второй член описывает избыточный или фликер шум. Последнее слагаемое соответствует генерационно-рекомбинационному шуму. На основании классических уравнений Ланжевена для флуктуации удается получить явное выражение для автокорреляционной функции и объяснить «канонический» вид спектра генерационно-рекомбинационного шума $C/(\omega^2 + a^2)$. Природа фликер шума до сих пор не выяснена.

Трудности на пути классических попыток объяснения природы фликер шума можно понять, если учесть, что ни одна из обычных автокорреляционных функций не может привести к закону $1/\omega^2$. Что касается канонического спектра, то и здесь классический подход не дает достаточно подробной информации, поскольку оперирует с неизвестной феноменологической константой-постоянной времени жизни носителей тока в зоне проводимости.

Все эти факты приводят к необходимости исследовать вопрос о частотном спектре рекомбинационных флуктуаций в рамках квантовых кинетических уравнений (поскольку в системе существенную роль играют дискретные уровни энергии). Именно на этом пути можно получить как явный вид всех феноменологических констант старой теории, так и возможные объяснения для отклонений от канонического вида спектра флуктуаций.

Введем функцию автокорреляции для квантовых флуктуаций^[3]

$$\varphi(t) = \frac{1}{2} Sp \{ [\Delta \hat{N}(t) \Delta \hat{N}(0) + \Delta \hat{N}(0) \Delta \hat{N}(t)], \rho_0 \}. \quad (1)$$

Здесь:

$\Delta \hat{N}(t) = \hat{N}(t) - \bar{N}$; $\hat{N}(t)$ — гейзенберговское представление оператора \hat{N} , $\rho_0 = z^{-1} e^{-\beta \hat{H}}$ — равновесная матрица плотности системы $z = Sp e^{-\beta \hat{H}}$; \hat{H} — гамильтониан системы. Ниже будут исследоваться флуктуации числа частиц \hat{N} в зоне проводимости, связанные с процессами генерации и рекомбинации на примесные центры. В этом случае статистическое усреднение в (1) будем проводить по большому ансамблю Гиббса, положив $\hat{H} = \hat{H} - \mu \hat{n}$, μ — химический потенциал, \hat{n} — оператор полного числа частиц.

Спектральная плотность интенсивности флуктуаций в интервале частот $d\omega = F(\omega) d\omega$ определяется интегралом Фурье от функции автокорреляции:

$$F(\omega) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} dt Sp \{ [\Delta \hat{N}(t) \Delta \hat{N}(0) + \Delta \hat{N}(0) \Delta \hat{N}(t)], \rho_0 \}. \quad (2)$$

Заметим, что аналогичное выражение для спектральной плотности (мощности) шума использовал Лэкс^[4].

Рассмотрим простоты ради кристалл кубической симметрии, содержащий примесные центры с энергетическим уровнем одной глубины ϵ_0 . Процессы рекомбинации и генерации на таких центрах могут происходить с отдачей либо поглощением энергии в виде одного или нескольких квантов бозонной подсистемы (в случае излучательной рекомбинации^[5] фотона, при тепловой — фононов^[6] и т. д.). Ниже простоты ради будет исследован одноквантовый механизм захвата (генерации). Поскольку взаимодействие с фотонным и фононным полем в представлении вторичного квантования записывается аналогично, все результаты, полученные для однофононной рекомбинации, автоматически могут быть перенесены на случай однофотонной (оптической) рекомбинации. Для определенности рассмотрим однофононный механизм захвата.

Гамильтониан задачи имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad (3)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_s \epsilon_0 a_s^+ a_s + \sum_j \hbar \omega_j b_j^+ b_j$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{jks} (A_{jks} a_k^+ a_s + A_{jks} a_s^+ a_k) (b_j + b_j^+) \quad (4)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{fk} A_f a_{k+f}^+ a_k (b_f + b_f^+),$$

здесь a_s и a_k — ферми операторы электронов соответственно на s -ом локальном уровне и в зоне проводимости; b_j^+ и b_j — операторы порождения и уничтожения фононов; $A_{jks} = A_{-jks} = C_j \int \Psi_s^* e^{-i(\vec{r}-\vec{r}_j)} \Psi_k d\vec{r}$; Ψ_s и Ψ_k — волновые функции электрона на центре и в зоне проводимости. C_j — коэффициентная функция электрон-фононного взаимодействия.

Наша задача состоит в вычислении функции $F(\omega)$ для величины $\Delta \hat{N} = \sum_k (\hat{n}_k - \bar{n}_k)$, где $\hat{n}_k = a_k^+ a_k$ — оператор числа частиц в зоне проводимости, \bar{n}_k — среднее число частиц с импульсом \vec{k} .

Введем в рассмотрение запаздывающие и опережающие функции Грина [7, 8].

$$G_{kk'}^{\pm}(t) = \mp \theta(\pm t) \langle [a_k^{\pm}(t) a_{k'}(t) | a_k^{\pm}(0) a_{k'}(0)]_{\pm} \rangle = \langle \langle a_k^{\pm} a_{k'} | a_k^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle. \quad (5)$$

Используя спектральные представления временных корреляционных функций [8] для $F(\omega)$ получаем:

$$F(\omega) = \frac{i}{4\pi} \sum_{kk'} [G_{kk'}(\omega + i\epsilon) - G_{kk'}(\omega - i\epsilon)]. \quad (6)$$

Здесь $G_{kk'}^{\pm}(E) = \frac{1}{2\pi} \int G_{kk'}^{\pm}(t) e^{iEt} dt; E = \omega \pm i\epsilon$.

Для функций $G_{kk'}(E)$ можно установить систему квантовых интегральных уравнений, аналогичных классическим кинетическим уравнениям.

§ 2. Вывод кинетических уравнений

Уравнения движения для функций Грина $G_{kk'}(t)$ имеют вид:

$$i \frac{dG_{kk'}}{dt} = \delta(t) \langle [a_k^{\pm} a_k; a_{k'}^{\pm} a_{k'}]_{\pm} \rangle + \sum_{fs} [A_{fsk} [\Gamma_{sk';k'}(f) + \Gamma_{sk';k'}(-f)] - A_{fks} [\Gamma_{ks';k'}(f) + \Gamma_{ks';k'}(-f)]] + \langle \langle a_k^{\pm} a_k, \hat{H}_2 | a_{k'}^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle. \quad (7)$$

Здесь $\Gamma_{\alpha\beta\gamma; k'}(f) = \langle \langle b_f a_{\alpha}^{\pm} a_{\beta}^{\pm} | a_{k'}^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle$ $\alpha\beta = \{ks\}$

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma; k'}(-f) = \langle \langle b_{-f}^{\pm} a_{\alpha}^{\pm} a_{\beta}^{\pm} | a_{k'}^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle. \quad (9)$$

Для функций типа (8) и (9) можно выписать аналогичные уравнения движения. При этом появляются два типа более сложных функций Грина

$$G_{\alpha\beta\gamma; k'}(-f, f_1) = \langle \langle b_{-f}^{\pm}, b_f a_{\alpha}^{\pm} a_{\beta}^{\pm} | a_{k'}^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle \quad (10)$$

$$G_{\alpha\beta\gamma\delta; k'} = \langle \langle a_{\alpha}^{\pm} a_{\beta}^{\pm} a_{\gamma} a_{\delta} | a_{k'}^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle. \quad (11)$$

Следуя известной процедуре, оборвем цепочку уравнений. Замкнем функции типа (10) и (11) на исходные, спаривая операторы, относящиеся к одному моменту времени, например:

$$\langle \langle b_f b_{-f}^{\pm} a_{k'}^{\pm} a_{k_1} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle \approx (1 + N_f) \delta_{-f, f_1} \langle \langle a_{k'}^{\pm} a_{k_1} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle$$

$$\langle \langle b_{-f}^{\pm} b_f a_{\alpha}^{\pm} a_{\beta}^{\pm} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle \approx N_f \delta_{-f, f_1} \langle \langle a_{\alpha}^{\pm} a_{\beta}^{\pm} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle \quad (12)$$

$$\langle \langle a_k^{\pm} a_{k_1} a_s^{\pm} a_{s_1} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle \approx n_s \delta_{ss_1} \langle \langle a_k^{\pm} a_{k_1} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle + n_k \delta_{kk_1} \langle \langle a_s^{\pm} a_{s_1} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle.$$

Решение системы уравнений для функций Грина в приближении (12) не представляет труда.

Аналогичную процедуру можно провести и с членами зонного рассеяния [10]. В итоге для фурье образа функции $G_{kk'}$ получаем:

$$E G_{kk'}(E) = X_{kk'} + \sum_s [W_{sk}(E) G_{sk'}(E) - G_{kk'}(E) W_{ks}(E)] + \sum_j [W_{k, k+j}(E) G_{k+j, k'}(E) - G_{kk'}(E) W_{k+j, k}(E)]. \quad (13)$$

Здесь обозначено:

$$W_{\alpha\beta}(E) = \sum_j |A_{j\alpha\beta}|^2 \left\{ \frac{(1 + N_j - n_{\beta})(2E)}{(\epsilon_k + \epsilon_0 - \hbar\omega_j)^2 - E^2} + \frac{(N_j + n_{\beta})(2E)}{(\epsilon_k - \epsilon_0 + \hbar\omega_j)^2 - E^2} \right\}; \quad (14)$$

$$W_{k+j, k}(E) = A_j^2 \left\{ \frac{(1 + N_j - n_{k+j})(2E)}{(\epsilon_{k+j} - \epsilon_k + \hbar\omega_j)^2 - E^2} + \frac{(N_j + n_{k+j})(2E)}{(\epsilon_{k+j} - \epsilon_k - \hbar\omega_j)^2 - E^2} \right\}; \quad (15)$$

$$X_{kk'} = \frac{1}{\pi} n_k (1 - n_k) \delta_{kk'} + \frac{1}{\pi} n_k n_{k'}$$

$$n_k = [\exp \{ \beta (\mu - \epsilon_k) \} + 1]^{-1}. \quad (16)$$

Уравнение (13) представляет собой аналог кинетического уравнения и содержит члены «ухода» и «прихода». Появление в нем гриновских функций $G_{sk'} = \langle \langle a_s^{\pm} a_s | a_{k'}^{\pm} a_{k'} \rangle \rangle$ показывает, что для полного описания рекомбинационной кинетики необходимо вспомогательное уравнение, описывающее процесс «поставки» (генерации) электронов из локальных центров в зону проводимости. Уравнение для функции $G_{sk'}$ можно получить, повторяя почти в точности вывод уравнения (13). Оно имеет вид:

$$E G_{sk'}(E) = X_{sk'} + \sum_k [W_{ks}(E) G_{kk'}(E) - G_{sk'}(E) W_{sk}(E)], \quad (17)$$

$$X_{sk'} = \frac{1}{\pi} n_s n_{k'}; \quad n_s = [\exp \{ \beta (\epsilon_0 - \mu) \} + 1]^{-1}. \quad (18)$$

При записи основных кинетических уравнений (13) и (17) удерживались лишь диагональные функции Грина и отбрасывались недиагональные функции вида $G_{kk'; k'} = \langle \langle a_k^{\pm} a_{k_1} | a_{k'}^{\pm} a_{k_1} \rangle \rangle$, так как их вклад более высокого порядка по константе электрон-фононного взаимодействия.

§ 3. Вычисление спектральной плотности интенсивности флуктуаций

Систему кинетических уравнений (13)–(17) в общем случае решить крайне трудно. Исследуем решение этой системы в двух предельных случаях: малых и больших частот. Характеристической частотой задачи является, очевидно, частота рекомбинационных переходов $\omega_{рек}$. Если $\omega \ll \omega_{рек}$, то вклад частотных слагаемых в столкновительные члены не велик и им можно пренебречь. В этом случае столкновительный член можно рассмотреть в приближении времени релаксации. Тогда уравнение (13) запишется в виде:

$$E G_{kk'}(E) = X_{kk'} + \sum_s [W_{sk}(E) G_{sk'}(E) - W_{ks}(E) G_{kk'}(E)] + i\tau \epsilon^{-1} G_{kk'}(E). \quad (19)$$

Здесь через τ обозначено время релаксации, связанное с процессом рассеяния на фононах.

Поскольку в рассматриваемой модели все локальные центры характеризуются энергетическим уровнем одной глубины, то функции W_{sk} , W_{ks} , G_{sk} не зависят от номера узла s . Поэтому система (17)–(19) в приближении времени релаксации по существу является алгебраической. Разрешая уравнение (19) относительно $G_{kk'}$ и подставляя его в (17), найдем выражение для G_{sk} . С помощью последней выражение для функции $G_{kk'}$ после суммирования по „ k' “ принимает вид:

$$G_k = \frac{X_k}{E - i\tau_c^{-1} + \sum_s W_{ks}} + \frac{\sum_s X_s W_{sk}}{E - i\tau_c^{-1} + \sum_s W_{ks}} \left[E + \frac{\sum_p (E - i\tau_c^{-1}) W_{sp}}{E - i\tau_c^{-1} + \sum_s W_{ps}} \right]^{-1} + \frac{\sum_s W_{sk}}{E - i\tau_c^{-1} + \sum_s W_{ks}} \frac{\sum_p X_p W_{ps}}{E - i\tau_c^{-1} + \sum_s W_{ps}} \left[E + \frac{\sum_p (E - i\tau_c^{-1}) W_{sp'}}{E - i\tau_c^{-1} + \sum_s W_{ps}} \right]^{-1}, \quad (20)$$

где $G_k = \sum_{k'} G_{kk'}$; $X_k = \sum_{k'} X_{kk'}$; $X_s = \sum_{k'} X_{sk'}$. (21)

С помощью (20) можно получить явное выражение для спектральной плотности интенсивности флуктуаций. Поскольку в формуле (20) $\tau_c^{-1} \gg (\text{Im} \sum_s W_{ks})$ (типичные значения для полупроводников $\tau_c^{-1} \sim 10^9 \div 10^{13}$ сек $^{-1}$; $\text{Im} \sum_s W_{ks} \sim \tau_{\text{рек}}^{-1} \sim 10^5 \div 10^7$ сек $^{-1}$), то при расчете $F(\omega)$ большинство слагаемых в (20) дает вклад в тепловой (найквистовский) шум с „белым“ спектром.

Приведем типичное слагаемое:

$$F(\omega) = \sum_{kp} \frac{X_s \cdot \text{Im} W_{sp} \cdot \tau_c^{-1} \cdot \sum_s \text{Im} W_{sk}}{\omega^2 + \left(\sum_k \text{Im} W_{sk} \right)^2} \quad (22)$$

Поскольку $\omega \ll \left(\sum_k \text{Im} W_{sk} \right)$, то в формуле (22) можно пренебречь частотной зависимостью спектра шумов.

Исследуем особенности частотной зависимости рекомбинационных шумов в области частот сравнимых с обратным временем жизни носителей тока. В этом случае приближение времени релаксации для столкновительного члена не законно и следует использовать уравнения (13) и (17). Для решения системы кинетических уравнений определим $G_{sk'}$ из (17) и подставим в уравнение (13). Полученное равенство просуммируем по « k » и « k' », тогда члены зонного рассеяния выпадают из расчета. В результате получаем:

$$E \sum_k G_k = \sum_k X_k + \sum_{ks} \frac{X_s W_{sk}}{E + \sum_p W_{sp}} + \sum_{ksp} \frac{W_{sk} W_{ps} G_p}{E + \sum_p W_{sp}} - \sum_{ks} W_{ks} G_k \quad (24)$$

Непосредственной подстановкой легко проверить, что решение уравнения (24) можно записать в виде:

$$G_k = \left[X_k + \sum_s \frac{X_s W_{sk}}{E + \sum_p W_{sp}} + \varphi_k \right] \left[E + \sum_s \frac{E W_{ks}}{E + \sum_p W_{sp}} \right]^{-1}, \quad (25)$$

где φ_k есть решение однородного уравнения

$$\sum_k \varphi_k = 0. \quad (26)$$

Вклад, вносимый в частотный спектр шума первыми двумя слагаемыми из (24) —

$$G_k^{(1)} = \left[X_k + \sum_s \frac{X_s W_{sk}}{E + \sum_p W_{sp}} \right] \left[E + \sum_s \frac{E W_{ks}}{E + \sum_p W_{sp}} \right]^{-1},$$

имеет вид:

$$F_1(\omega) = \sum_k \frac{X_k \tau_k^{-1} + A_k}{(\omega + \gamma_k)^2 + \tau_k^{-2}}. \quad (27)$$

Здесь

$$\gamma_k = \sum_s \text{Re} W_{sk} + \sum_s \text{Re} W_{ks},$$

$$\tau_k^{-1} = \sum_s \text{Im} W_{sk} + \sum_s \text{Im} W_{ks}. \quad (28)$$

Как непосредственно следует из формулы (27) вид спектра $F_1(\omega)$ совпадает с каноническим, когда знаменатель является слабой функцией от « k » (в случае рекомбинации на нейтральные центры). В общем случае, однако, $F_1(\omega)$ может давать поправки в характер канонического спектра. Все входящие в него константы известны. Что касается вклада φ_k в спектр шума, то в общем случае определить его не удастся. Однако, поскольку $\sum_s W_{ks}$ слабо зависит от « k », в грубом приближении можно вынести в выражении

$$\sum_k \frac{\varphi_k}{E + \sum_s \frac{E W_{ks}}{E + \sum_p W_{sp}}} \quad (29)$$

знаменатель за знак суммы при некотором среднем значении. Тогда, согласно (26), вклад от этого слагаемого строго равен нулю. Заметим, что при малых ω ($E \rightarrow 0$) член с φ_k имеет особенность и его отбрасывание требует обоснования.

Таким образом, проведенная в работе оценка частотного спектра генерационно-рекомбинационных флуктуаций позволила найти все основные константы теории и получить для частот, сравнимых с обратным временем жизни носителей тока, супперпозицию элементарных «канонических» спектров шума. Более подробный анализ спектра шумов требует конкретизации реальной модели центра и учета других возможных механизмов рекомбинации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ван-Дер-Зил, Флуктуационные явления в полупроводниках, ИИЛ, М., 1961.
2. Д. Н. Мирлин, Сб. Полупроводники в науке и технике, т. 2, Изд-во АН СССР, 1958, стр. 516.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, ГИТТЛ, М., 1957, стр. 451.
4. Найквист, Phys. Rev. 32, 110 (1928).
5. М. Лэкс, Phys. Rev. 109, № 6, 1921 (1958).
6. Покровский и Свистунова, ФТТ, № 3 (1961).
7. Ю. Е. Перлин, УФН, т. 80, вып. 4, 1963.
8. В. Л. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов, Метод функций Грина в статистической механике, ГИФМЛ, М., 1961.
9. Д. М. Зубарев, УФН, т. 71, вып. 1, 1960.
10. С. В. Тябликов, В. Л. Бонч-Бруевич, Теория возмущений для двухвременных температурных функций Грина. Препринт Математического института им. Стеклова АН СССР, М., 1962.
11. Н. М. Плакида, ДАН СССР, т. 147, № 55, 1962.

В. А. КОВАРСКИЙ, Е. В. ВИТИУ

КУ ПРИВИРЕ ЛА ТЕОРИЯ ФЛУКТУАЦИИЛОР ДЕ ЖЕНЕРАЦИИ
ШИ РЕКОМБИНАРЕ ЫН СЕМИКОНДУКТОРЬ

Резумат

Прин метода функциилор куантиче але луй Грин се черчетязэ флукутацииле денситэций аженцилор де курент, даторитэ женерацей ши рекомбинэрий пе центреле де импуритэць. Пентру фреквенце компарабиле ку время де трай а аженцилор с'а кэпэтит суперпозиция спектрелор элементарэ «канониче» але згомотулуй ын семикондукторь.

В. А. КОВАРСКИЙ, И. А. ЧАЙКОВСКИЙ

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ РЕКОМБИНАЦИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

§ 1. Постановка задачи

Включение сильного магнитного поля приводит к ряду особенностей в динамике электронов проводимости в твердом теле. При определенных условиях наступает квантование Ландау и режим процессов рекомбинации может претерпеть изменения. Представляет интерес развить теорию рекомбинации в этом случае. Поскольку классическое кинетическое уравнение неприменимо, необходимо использовать формализм квантового кинетического уравнения.

Пусть в начальный момент $t=0$ имеется квазиравновесное распределение ν частиц по энергетическим уровням. При этом n частиц находится в зоне проводимости и $N=n$ частиц — в связанном состоянии на локальных уровнях центров рекомбинации. Рассмотрим процесс релаксации, состоящий в выравнивании с течением времени концентраций вплоть до равновесных статистических значений путем элементарных актов рекомбинаций. В качестве механизма рекомбинации простоты ради исследуется однофононный механизм захвата на локальные уровни. Статистический оператор начального состояния удобно представить в виде

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}, \quad (1)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu_2 \hat{N} - \mu_1 n; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2)$$

Здесь \hat{H} — гамильтониан системы; μ_1, μ_2 — квазиуровни Ферми частиц в свободном и связанном состояниях, Z — статистическая сумма. Так как коммутатор $[\hat{H}, \rho_0]$ в этом случае отличен от нуля^[3], решение уравнения для матрицы плотности в линейно-диссипативном приближении по отклонению начального состояния от равновесия дает для среднего числа частиц в зоне проводимости следующее выражение:

$$\bar{n}(t) = \text{Sp.} \{ n(0), \rho_0 \} - \Delta n(t), \quad (3)$$

$$\Delta n(t) = \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega\tau} [\psi^+(\omega) + \psi^{(-)}(\omega)] d\omega, \quad (4)$$

$$\psi^\pm(\omega) = \sum_a \psi_{a\pm}^\pm(\omega), \quad (5)$$

$$\psi_{\alpha\alpha}^+(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\mu'}{Z} \int_{-\infty}^0 e^{i\tau' - i\omega\tau'} d\tau' \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H_0'} \times \right. \\ \left. \times T_c \exp. \left[(i\hbar)^{-1} \int_c \hat{V}(z) dz \right] \hat{n}_\alpha (-i\hbar\lambda) \hat{V}(-\tau) \right\}, \quad (6a)$$

$$\psi_{\alpha\alpha}^-(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\mu'}{Z} \int_0^{\infty} e^{-i\tau' - i\omega\tau'} d\tau' \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H_0'} \times \right. \\ \left. \times T_c \exp. \left[(i\hbar)^{-1} \int_c \hat{V}(z) dz \right] \hat{n}_\alpha (-i\hbar\lambda) \hat{V}(-\tau) \right\}. \quad (6b)$$

Здесь: $H = H_0 + V$; $\mu' = \mu_1 - \mu_2$; T_c — означает упорядочение вдоль контура $C^{[2]}$; $\hat{A}(x)$ — представление взаимодействия оператора \hat{A} :

$$\hat{A}(x) = e^{i/h [\hat{H}_0 - \mu_2(\hat{n} + N)]} \times \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0 - \mu_2(\hat{n} + N)]}$$

α — набор квантовых чисел электрона в зоне проводимости. При выводе (4) принято, что $[\hat{H}_0, \hat{n}] = 0$.

Направим магнитное поле вдоль оси z и выберем векторные потенциалы $\vec{A} = (Hy, 0, 0)$.

Гамильтониан системы кристалл + локальные центры + магнитное поле есть:

$$H_0 = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \sum_s \epsilon_s a_s^{\dagger} a_s + \sum_f \hbar \omega_f b_f^{\dagger} b_f \quad (7)$$

$$\hat{V} = \hat{V}_r + \hat{V}_c; \quad \hat{V}_r = \sum_{\alpha s f} (A_{f s \alpha} a_s^{\dagger} a_{\alpha} + A_{f s \alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_s) c_f (b_f + b_f^{\dagger}) \quad (8)$$

Здесь $\epsilon_{\alpha} = \frac{\hbar^2 k_{\alpha}^2}{2m} + \hbar \omega_{\alpha} (n_{\alpha} + 1/2)$ — собственные значения энергии электрона проводимости в магнитном поле; $\alpha = (l, k_x, k_z)$

l — квантовое число, характеризующее уровень Ландау, k_x и k_z — проекции волнового вектора электрона; $\epsilon_s = -|\epsilon_0|$ — энергия основного состояния электрона на локальном центре; ω_f — частота фонона с волновым вектором f ; $a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\alpha}$; a_s^{\dagger}, a_s — операторы порождения и уничтожения электронов соответственно в зоне проводимости и на локальных центрах; c_f — характеризует взаимодействие электронов с фононами.

$$A_{f s \alpha} = \int \varphi_s^* e^{i\vec{r} \cdot \vec{q}} \varphi_{\alpha} d\vec{r} \quad (9)$$

$$\varphi_{\alpha} = \varphi_e(k_x, k_z) = \frac{(L_x L_z)^{-1/2} \gamma^{1/2}}{\sqrt{2\pi \cdot 11 \gamma^{-\pi}}} e^{i\kappa x + i\kappa_z z} e^{-1/2 \gamma^2 (y + y_0)^2} H_{\epsilon}[\gamma(y + y_0)] \quad (10)$$

$$y_0 = -\kappa_x \frac{\hbar c}{eH}; \quad \gamma = \sqrt{\frac{eH}{\hbar c}}. \quad (11)$$

$H_{\epsilon}(x)$ — полином Эрмита — Чебышева, L_x, L_z — размеры кристалла в направлении x, z ; φ_s — волновая функция электрона на локальном

центре. Выражение для V_c , описывающее взаимодействие зонного электрона с рассеивателем, непосредственно не понадобится и исследовано в [2].

При выводе (7) и (8) предполагалось, что магнитное поле не искажает локальные состояния электрона [4]. Смещение уровня от взаимодействия с колебаниями решетки принимается малым и не учитывается. Ниже будет рассмотрено выражение для $\Delta n(t)$ и установлен вид постоянной времени процесса рекомбинации в квантующем магнитном поле. В заключение работы исследуется спектр рекомбинационных шумов, зависящий существенным образом от постоянной времени жизни.

§ 2. Влияние магнитного поля на квантовый этап процесса рекомбинации

Воспользуемся графической техникой, сформулированной в [2]. Для одночастичных матриц $\psi_{\alpha\alpha}^{\pm}$ нетрудно установить следующую систему квантовых кинетических уравнений:

$$\psi_{\alpha\alpha}^{\pm}(\epsilon \mp i\omega + i\omega_{\alpha}) = X_{\alpha\alpha}^{\pm} + \sum_{\beta\beta'} \psi_{\beta\beta'}^{\pm} \{ W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm} + W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm} \} + \\ + \sum_s \psi_{s s}^{\pm} W_{(\alpha\alpha, s s)}^{\pm} \quad (12)$$

$$\psi_{s s}^{\pm}(\epsilon \mp i\omega) = Y_{s s}^{\pm} + \sum_{\beta\beta'} \psi_{\beta\beta'}^{\pm} W_{(s s, \beta\beta')}^{\pm} + \sum_{s'} \psi_{s' s'}^{\pm} W_{(s s, s' s')}^{\pm}. \quad (13)$$

В уравнениях (12) — (13) $X_{\alpha\alpha}^{\pm}, Y_{s s}^{\pm}$ — угловые части; $W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm}, W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm}$ — неприводимые части соответственно для столкновительного и рекомбинационного членов. (Терминология [1]). Матрица $\psi_{\alpha\alpha}^{\pm}(\omega)$ аналогична матрице $\psi_{\alpha\alpha}^{\pm}(\omega)$, в которой следует лишь произвести замену $\hat{n}_{\alpha}(-i\hbar\lambda) \rightarrow n_{\alpha}(-i\hbar\lambda)$. Как будет видно из дальнейшего, характеристическое значение $i\omega \sim \tau_{\text{рек}}^{-1}$, т. е. порядка постоянной времени жизни. Соответствующее затухание для реальных полупроводников $\leq 10^{-8} eV$ ($\tau_{\text{рек}} \sim 10^{-2} - 10^{-7}$ сек). В этой связи целесообразно удерживать зависимость от ω в угловых и неприводимых частях. Приведем в пренебрежении затуханием необходимые для дальнейшего выражения для $X_{\alpha\alpha}^{\pm}$ и $W_{\alpha\alpha}^{\pm}$, вычисленные во втором порядке по константе электрон-фононного взаимодействия:

$$X_{\alpha\alpha}^{\pm} = \frac{\mu'}{\pi \hbar^2} \sum_{f, s} |C_f|^2 |A_{f s \alpha}|^2 \frac{n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}) (1 - n_s + N_f)}{\kappa_s T (\omega_{\alpha s} - \omega_f)} \quad (14)$$

$$W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm} = -\frac{2\pi}{\hbar^2} \delta_{\alpha\beta} \sum_{f, s} |C_f|^2 |A_{f s \alpha}|^2 (1 - n_s + N_f) \delta(\omega_{\alpha s} - \omega_f), \quad (15)$$

где $\omega_{\alpha s} = (\epsilon_{\alpha} - \epsilon_s)/\hbar = \frac{\epsilon_{\alpha} + |\epsilon_0|}{\hbar}$.

(Остальные неприводимые части будут выписаны в § 2.). В уравнениях (12) — (13) можно ограничиться диагональным приближением в члене $\sum_{\beta\beta'} W_{\beta\beta'}^{\pm} \{ \dots \}$. Действительно, простейшая недиагональная

функция $\psi_{\alpha\alpha}^{\pm} = \frac{X_{\alpha\alpha}^{\pm 0}}{i(\mp i\omega + \epsilon)}$. Поскольку $X_{\alpha\alpha}^{\pm 0}$ пропорциональна квадрату константы связи, учет членов недиагональности в (14) — (15) означал бы учет членов четвертого порядка по константе Фрелиха. В диагональном приближении система (14) — (15) принимает вид:

$$\psi_{\alpha\alpha}^{\pm} (\mp i\omega + \epsilon) = X_{\alpha\alpha}^{\pm} + \sum_{\beta} \psi_{\beta\beta}^{\pm} \left\{ W_{\alpha\alpha;\beta\beta}^{\pm c} + W_{(\alpha\alpha;\beta\beta)}^{\pm r} \right\} + \sum_s \psi_{ss}^{\pm} W_{(\alpha\alpha)(ss)}^{\pm} \quad (16)$$

$$\psi_{ss}^{\pm} (\mp i\omega + \epsilon) = Y_{ss}^{\pm} + \sum_{\beta} \psi_{\beta\beta}^{\pm} W_{(ss)(\beta\beta)}^{\pm} + \sum_{s'} \psi_{s's'}^{\pm} W_{(ss)(s's')}^{\pm} \quad (17)$$

Исследуем процесс релаксации, для которого определяющим является „уход“ электронов из зоны проводимости на локальные уровни. Другими словами, число „уходов“ из зоны намного превосходит число „приходов“ из локальных центров в зону. В этом случае последний член формулы (16) несущественен и вкладом уравнения (17) в общее решение можно пренебречь.

Просуммируем уравнение (16) по α . Получим:

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha\alpha}^{\pm} (\mp i\omega + \epsilon) = \sum_{\alpha} X_{\alpha\alpha}^{\pm} + \sum_{\alpha} \psi_{\alpha\alpha}^{\pm} W_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} \quad (18)$$

Вклад членов столкновений после суммирования по α равен нулю.

Величина $W_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^r$ пропорциональна вероятности „ухода“ из зоны проводимости. Очевидно, что поскольку $(W_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r})^{-1} \gg (W_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm c})^{-1}$, то за время „ухода“ успеет установиться равновесное распределение с рассеивателем и с большой степенью точности

$$W_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} \cong \overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} \quad (19)$$

Здесь

$$\overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} = \frac{\sum_{\alpha} e^{-\beta \epsilon_{\alpha}} W_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r}}{\sum_{\alpha} e^{-\beta \epsilon_{\alpha}}} \quad (20)$$

В приближении (19) решение уравнения (18) имеет вид:

$$\sum_{\alpha} \psi_{\alpha\alpha}^{\pm} = \frac{\sum_{\alpha} X_{\alpha\alpha}^{\pm}}{\mp i\omega - \overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r}} \quad (21)$$

Подставим (21) в формулу (4). Интегралы вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau} \frac{1}{\mp i\omega - \overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r}} d\omega \quad (22)$$

берутся в комплексной плоскости ω замыканием контура в верхней полуплоскости (вычет в точке: $\omega = i | \overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} |$). В итоге получим:

$$\overline{\Delta n}(t) = 2\pi \sum_{\alpha} X_{\alpha\alpha}^{\pm} \left(\sum_{\alpha'} \overline{W}_{(\alpha'\alpha';\alpha'\alpha')}^{\pm r} \right)^{-1} \left[1 - \exp(-| \overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} | t) \right] \quad (23)$$

Как непосредственно следует из формулы (23), выражение (20) имеет смысл обратного времени жизни по отношению к процессу рекомбинации, т. е. $\{ | \overline{W}_{(\alpha\alpha)(\alpha\alpha)}^{\pm r} | \}^{-1} = \tau_{\text{рек}}$, где $\tau_{\text{рек}}$ — постоянная времени жизни.

Для рассмотрения влияния магнитного поля на эту величину выберем в качестве модели локального центра модель с волновой функцией основного состояния в виде:

$$\varphi_s = B e^{-a^2 r^2}; \quad B = \left(\frac{2 a^2}{\pi} \right)^{3/4} \quad (24)$$

где a — обратный радиус центра.

Расчет квадрата матричного элемента дает

$$\begin{aligned} | A_{e, k_x, k_z; s; f} |^2 &= \frac{2^{1/2} \pi \gamma (L_x L_z)^{-1}}{2^c \cdot e! a^3} \left(\frac{1 - \nu_0^2}{1 \times \nu_0^2} \right)^c \times \\ &\times \exp \left\{ - \frac{(k_x + f_x)^2}{2 a^2} - \frac{(k_z + f_z)^2}{2 a^2} - \frac{\gamma^2 y_0^2}{1 + \nu_0^2} - \frac{f_y^2}{2 a^2 (1 + \nu_0^2)} \right\} \times \\ &\times H_c \left(\frac{\gamma y_0}{\sqrt{1 - \nu_0^2}} + \frac{i \gamma f_y}{2 a^2 \sqrt{1 - \nu_0^2}} \right) H_c \left(\frac{\gamma y_0}{\sqrt{1 - \nu_0^2}} - \frac{i \gamma f_y}{2 a^2 \sqrt{1 - \nu_0^2}} \right); \\ \nu_0^2 &= \frac{\gamma^2}{2 a^2} \quad (25) \end{aligned}$$

Рассмотрим взаимодействие с акустическими волнами. Расчет $\tau_{\text{рек}}$ проведем в квантовом пределе, когда возбужден уровень с $l=0$ (низкие температуры и сильные магнитные поля). Найдем:

$$\tau \approx \frac{L^3}{\sum_s (1 - n_s)} \frac{h^2 \rho s^4 a^2}{4 \pi \rho c^2 \epsilon_0^2} \exp \left(\frac{\epsilon_0^2}{2 h^2 a^2 s^2} \right) F(\nu_0) \quad (26)$$

$$F(\nu_0) = \nu_0 \exp \left\{ - \frac{2 | \epsilon_0 | \nu_0^2}{m s^2} \left(\frac{\epsilon_0 m}{4 h^2 a^2} - 1 \right) \right\} \quad (27)$$

Здесь ρ — плотность; s — скорость звука; C_0 — константа деформационного потенциала, m — эффективная масса электрона.

Для типичных значений параметров полупроводника типа германия^[5] ($\epsilon_0 \sim 10^{-2}$ эв, $s \sim 5 \cdot 10^5 \frac{\text{см}}{\text{сек}}$; $m \sim 4 \cdot 10^{-28} \sim a \sim 10^6 \text{ см}^{-1}$) функция $F(\nu_0)$ возрастает при циклотронных частотах $\omega_c \sim 10^{10} \div 10^{12} \text{ сек}^{-1}$, т. е. во всем интервале достижимых частот время жизни должно увеличиваться с ростом магнитного поля, т. е. должно иметь место „затягивание времени жизни магнитным полем“. Заметим, что в области слабых полей формула (26) не работает, так как при ее выводе существенно использовалось предположение $\omega_c \tau_{\text{рек}} \gg 1$. Кроме того,

в области очень высоких частот расчет также теряет смысл, так как магнитный радиус становится сравнимым с радиусом орбиты связанного электрона и метод эффективной массы не проходит^[6].

§ 3. Генерационно-рекомбинационные шумы в магнитном поле

Представляет интерес исследовать влияние магнитного поля на частотный спектр и абсолютную величину флуктуаций носителей тока, связанных с процессами рекомбинации (генерационно-рекомбинационный шум). Это тем более важно, поскольку постоянная времени жизни во многом определяет уровень шумов.

Введем функцию автокорреляции для квантовых флуктуаций

$$\varphi(t) = \frac{1}{2} \text{Sp} \left\{ \left[\Delta \hat{n}(t) \Delta \hat{n}(0) + \Delta \hat{n}(0) \Delta \hat{n}(t) \right], \rho_0 \right\}. \quad (28)$$

Здесь $\hat{n}(t) = \bar{n}(t) - \bar{n}$; $\hat{n}(t)$ — гайзенберговское представление оператора \hat{n} ; $\rho_0 = Z^{-1} e^{-\beta H}$ — равновесная матрица плотности; H — гамильтониан системы. Ниже будут исследоваться флуктуации числа частиц n в зоне проводимости, связанные с процессами рекомбинации и генерации на примесные центры. В этом случае статистическое усреднение удобно проводить по большому ансамблю Гиббса, положив $H = H - \mu \hat{N}$, где μ — химический потенциал, \hat{N} — оператор полного числа частиц.

Спектральная плотность интенсивности флуктуаций в интервале частот $d\omega - F(\omega) d\omega$ определяется интегралом Фурье от функции автокорреляции:

$$F(\omega) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} dt \text{Sp} \left\{ \left[\Delta \hat{n}(t) \Delta \hat{n}(0) + \Delta \hat{n}(0) \Delta \hat{n}(t) \right] \rho_0 \right\}. \quad (29)$$

Заметим, что аналогичное выражение для спектральной плотности (мощности) шума использовал Лэкс^[8]. Выражение (29) может быть сведено методами, аналогичными § 1 к виду:

$$F(\omega) = \sum_{\alpha} F_{\alpha\alpha}(\omega) \quad (30)$$

$$F_{\alpha\alpha}^+(\omega) = \sum_{\beta} \int_{-\infty}^0 e^{-i\omega\tau} e^{\beta\tau} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H_0} T c_1, \exp \left[(i\hbar)^{-1} \int V(z) dz \right] \times \right. \\ \left. \times \hat{n}_{\alpha}(0) \hat{n}_{\beta}(\tau) \right\} d\tau \quad (31)$$

$$F_{\alpha\alpha}^-(\omega) = \sum_{\beta} \int_0^{\infty} e^{-i\omega\tau} e^{-\beta\tau} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta H_0} T c_2, \exp \left[(i\hbar)^{-1} \int V(z) dz \right] \times \right. \\ \left. \times \hat{n}_{\alpha}(0) \hat{n}_{\beta}(\tau) \right\} d\tau. \quad (32)$$

Здесь контур C_1 — составной. (рис. 1). Остальные обозначения в § 2.

Выражения (31) и (32) могут быть проанализированы с помощью перехода к графической технике^[2]. При этом следует учесть, что правила вкладов для контура дополняются требованиями: точки на вертикальных участках контура должны браться либо только на верхнем, либо только на нижнем участках; вклады неприводимых частей удваиваются. Уравнения для одночастичных матриц задачи имеют вид:

$$F_{\alpha\alpha}^{\pm}(\pm i\omega + \varepsilon) = X_{\alpha\alpha}^{\pm} + \sum_{\beta\beta'} F_{\beta\beta'}^{\pm} \left\{ W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm r} + W_{(\alpha\alpha, \beta\beta')}^{\pm c} \right\} + \sum_{s'} F_{s's'}^{\pm} W_{(\alpha\alpha, s's')}^{\pm} \quad (33)$$

$$F_{ss}^{\pm}(\pm i\omega + \varepsilon) = \Delta V_{ss} + \sum_{\beta\beta'} W_{(ss, \beta\beta')} F_{\beta\beta'}^{\pm} + \sum_{s'} W_{(ss, s's')} F_{s's'}^{\pm}. \quad (34)$$

Здесь матрицы $F_{\beta\beta'}$ и F_{ss} той же структуры, что и $F_{\alpha\alpha}$, следует лишь произвести замену индексов $\alpha\alpha \rightarrow \beta\beta'$; либо ss . Уравнение для матриц $F_{\beta\beta'}$ здесь не будет исследоваться, так как при решении системы (33—34) будет использоваться лишь диагональное приближение. Последнее обстоятельство возможно, если взаимодействие с диссипативной подсистемой невелико^[3].

Выражения для диагональных угловых и неприводимых частей имеют вид:

$$X_{\alpha\alpha}^{\pm} = X_0 + \Delta X_{\alpha\alpha}^{\pm}$$

$$X_0 = n_{\alpha} (1 - n_{\alpha})$$

$$\Delta X_{\alpha\alpha}^{\pm} = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{fs} \frac{|c_f|^2 |A_{fs\alpha}|^2}{\omega_{\alpha s} - \omega_f} \left\{ \left[(1 - n_{\alpha}) n_s N_f - n_{\alpha} (1 - n_s) (1 + N_f) \right] \times \right. \\ \times \left(\frac{n_{\alpha}}{\omega_{\alpha s} - \omega_f - \omega} - \frac{1 - n_{\alpha}}{\omega_{\alpha s} - \omega_f + \omega} \right) + \left[(1 - n_{\alpha}) n_s (1 + N_f) - \right. \\ \left. - n_{\alpha} (1 - n_s) N_f \right] \left(\frac{n_{\alpha}}{\omega_{\alpha s} + \omega_f - \omega} - \frac{1 - n_{\alpha}}{\omega_{\alpha s} + \omega_f + \omega} \right) \left. \right\}^{\pm} \\ \pm \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{1}{i} \sum_{fs} \frac{|c_f|^2 |A_{fs\alpha}|^2}{(\omega_{\alpha s} - \omega_f)} \left[(1 - n_{\alpha}) n_s N_f - n_{\alpha} (1 - n_s) (1 + N_f) \right] \times \\ \times \left[n_{\alpha} \delta(\omega_{\alpha s} - \omega_f - \omega) + (1 - n_{\alpha}) \delta(\omega_{\alpha s} - \omega_f + \omega) \right]. \quad (37)$$

$$W_{(\alpha\alpha, ss)}^{\pm} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \sum_f |c_f|^2 |A_{fs\alpha}|^2 (n_s + N_f) \left[\delta(\omega_{\alpha s} - \omega_f + \omega) + \right. \\ \left. + \delta(\omega_{\alpha s} - \omega_f - \omega) \right] \pm \frac{4i}{\hbar^2} \sum_f |c_f|^2 |A_{fs\alpha}|^2 \times \\ \times \left\{ (n_{\alpha} + N_f) \frac{2\omega}{(\omega_{\alpha s} - \omega_f)^2 - \omega^2} + (1 - n_{\alpha} + N_f) \frac{2\omega}{(\omega_{\alpha s} + \omega_f)^2 - \omega^2} \right\}. \quad (38)$$

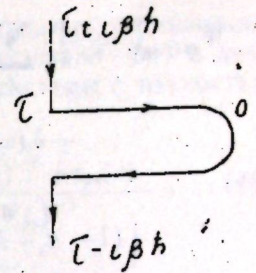


Рис. 1

$$W_{(ss) (aa)}^{\pm} = \frac{4\pi}{h^2} \sum_f |c_f|^2 |A_{fsz}|^2 (1 - n_s + N_f) \left[\delta(\omega_{ss} - \omega_f + \omega) + \delta(\omega_{ss} - \omega_f - \omega) \right] \pm \frac{4i}{h^2} \sum_f |c_f|^2 |A_{fsz}|^2 \times \left\{ (1 - n_s + N_f) \frac{2\omega}{(\omega_{ss} - \omega_f)^2 - \omega^2} + (n_s + N_f) \frac{2\omega}{(\omega_{ss} + \omega_f)^2 - \omega^2} \right\} \quad (39)$$

$$\left. \begin{aligned} W_{(ss) (ss)} &= - \sum_{\alpha} W_{(\alpha z) (s s)} \\ W_{(\alpha z) (\alpha z)} &= - \sum_{\alpha} W_{(s s) (\alpha z)} \\ \sum_s \Delta Y_{ss} &= - \sum_{\alpha} \Delta X_{\alpha z} \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

Решение системы уравнений (33–39) в диагональном приближении целесообразно исследовать в двух предельных случаях малых и больших частот. Характеристической частотой задачи является $\omega \approx \omega_{рек} \sim 10^4 - 10^7 \text{ сек}^{-1}$. Если $\omega \ll \omega_{рек}$, то учет членов рассеяния можно провести в приближении времени релаксации. В этом случае система (33–34) сводится к следующей:

$$F_{\alpha z}^{\pm} (\varepsilon \mp i\omega) = X_{\alpha z}^{\pm} + \sum_{\beta} W_{(\alpha z) (\beta \beta)}^{\pm} F_{\beta \beta}^{\pm} + \sum_s W_{(\alpha z) (ss)}^{\pm} F_{ss}^{\pm} - F_{\alpha z}^{\pm} \cdot \tau_c^{-1} \quad (41)$$

$$F_{ss}^{\pm} (\varepsilon \mp i\omega) = \Delta Y_{ss}^{\pm} + \sum_{\beta} W_{(ss) (\beta \beta)}^{\pm} F_{\beta \beta}^{\pm} + \sum_{s'} F_{s's'}^{\pm} W_{(ss) (s's')}^{\pm} \quad (42)$$

В (41) τ_c есть время релаксации.

Поскольку F_{ss}^{\pm} не зависит от номера узла (энергия всех центров одинакова и равна $|\varepsilon_0|$) и $W_{(\alpha z) (\beta \beta)}^{\pm} \sim \delta_{\alpha\beta}$, то система (41–42) сводится к алгебраической. В результате получим:

$$F_{\alpha z}^{\pm} = \frac{1}{\mp i\omega + \tau_c^{-1} - W_{\alpha z}^{\pm}} \left\{ X_{\alpha z}^{\pm} + \sum_s \left(\mp i\omega - W_{ss}^{\pm} - \sum_{\beta} \frac{W_{s\beta} W_{\beta s}}{\mp i\omega + \tau_c^{-1} - W_{\beta\beta}} \right)^{-1} \times \right. \\ \left. \times \left[\Delta Y_{ss}^{\pm} W_{\alpha s}^{\pm} + \sum_{\beta} W_{s\beta}^{\pm} X_{\beta\beta}^{\pm} \left(\mp i\omega + \tau_c^{-1} - W_{\beta\beta}^{\pm} \right)^{-1} \right] \right\} \quad (43)$$

$$W_{(\alpha z) (\beta \beta)} = W_{\alpha\beta}$$

С помощью полученного выражения можно по формуле (29) вычислить спектральную плотность интенсивности шумов. Приведем типичное слагаемое:

$$F(\omega) \sim \sum_{\alpha, s} \left\{ \Delta Y_{ss} W_{\alpha s} \sum_{\beta} W_{\beta s} \left[\tau_c^{-1} (\omega^2 + \left(\sum_{\beta} W_{\beta s} \right)^2) \right] \right\}^{-1} \quad (44)$$

Поскольку $\omega \ll \sum_{\beta} W_{\beta s}$, то спектр шумов — “белый”.

Рассмотрим далее область частот $\omega \gg \omega_{рек}$. В этой области приближение времени релаксации незаконно, так как соответствующие

частотные поправки в столкновительный член порядка рекомбинационных членов. Исходной по-прежнему является система (33–34) в диагональном приближении. Приведем решение этой системы с точностью до решения однородного уравнения:

$$F_{\alpha z}^{\pm}(\omega) = \sum_s \frac{X_{\alpha z}^{\pm} + \Delta Y_{ss}^{\pm} W_{(\alpha z) (ss)}^{\pm} (\mp i\omega - W_{ss})^{-1} + \eta_{\alpha z}(\omega)}{\mp i\omega \mp i\omega W_{sa} (\mp i\omega - W_{ss})^{-1}} \quad (48)$$

Здесь $\eta_{\alpha z}(\omega)$ удовлетворяет уравнению:

$$\sum_{\alpha} \eta_{\alpha z}(\omega) = 0 \quad (49)$$

Вклад в спектр, связанный, например, со слагаемым $X_{\alpha z}$, имеет вид:

$$F_1(\omega) = \sum_{\alpha, s} \frac{X_{\alpha z} W_{\alpha z}}{\omega^2 + W_{\alpha z} + W_{ss}} \quad (50)$$

Вклад второго слагаемого формулы (48) аналогичен. Что касается вклада $\eta_{\alpha z}(\omega)$, то он в грубом приближении равен нулю, если вынести функцию $\mp i\omega \mp \frac{i\omega W_{sa}}{\mp i\omega - W_{sa}}$ за знак суммы по α в (30) при некотором среднем значении. Такое приближение имеет, видимо, смысл, если ω — достаточно большая величина (знаменатель в (48) не имеет особенностей). Спектр шумов (50) совпадает с каноническим спектром^[10], если вынести знаменатель при некотором среднем.

Специфика магнитного поля в соответствии с (26) сводится к эффекту “демпфирования” шумов.

ЛИТЕРАТУРА

1. О. В. Константинов, В. И. Перель, ЖЭТФ, 39, 197 (1961).
2. Л. Э. Гуревич, Г. М. Недлин, ЖЭТФ, 40, 809 (1961).
3. W. Kohn, I. Luttinger, Phys. Rev. 108, 590 (1957). (см. перевод. «Вопросы квантовой теории необратимых процессов» (ВКТП), сб. статей под ред. В. А. Бонч-Бруевича, М., 1961 г.).
4. R. F. Wallis, H. T. Bowlden, I. Phys. Chem. Solids, 8, 318, (1959) (см. перевод. сб. статей «Проблемы физики полупроводников», ИЛ, М., 1957 г.).
5. В. А. Коварский, ЖЭТФ, 33, 1145 (1957).
6. I. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. 97, 869 (1955).
7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, ГИТТЛ, М., 1957.
8. M. Lax, Phys. Rev. 109, 1921 (1958). (см. перевод ВКТП, стр. 225).
9. Д. Н. Мирлин, Полупроводники в науке и технике, т. II, изд. АН СССР, М., 1958, стр. 516.
10. Ван-дер-Зил, Флуктуационные явления в полупроводниках. ИИЛ, М., 1961.

В. А. КОВАРСКИЙ, И. А. ЧАЙКОВСКИЙ

ЕКВАЦИИЛЕ ЧИНЕТИЧЕ ПЕНТРУ ПРОЧЕСЕЛЕ ДЕ РЕКОМБИНАРЕ ЫН КЫМПУЛ МАГНЕТИК КУАНТИК

Резумат

Прин техника диаграмелор луй Константинов ши Перел ый черчетатэ рекомбинация аженцилор де курент ын презенца кымпулуй магнетик куантик. Се аратэ, кэ тимпул витал ал аженцилор ын кымпул магнетик се мэреште одатэ ку крештера тенсиуний. Се черчетязэ инфлуенца кымпулуй магнетик асупра спектрулуй де згомот ын семикондукторь.

В. Н. ЛАНГЕ, Т. И. ЛАНГЕ, С. Д. ШУТОВ

АНИЗОТРОПИЯ МИКРОТВЕРДОСТИ Sb_2Se_3

К настоящему времени получен значительный экспериментальный материал, свидетельствующий об анизотропии микротвердости по вдавливанию [1—5] и по царапанию [6—10] даже в кристаллах кубической сингонии [1, 2, 6, 9], обладающих наиболее высокой симметрией. Однако интерпретацию полученных результатов нельзя считать достаточно полной, поскольку на примере грани (0001) кристаллов теллура [8] можно убедиться, что анизотропию микротвердости по царапанию не всегда удается объяснить расположением известных плоскостей спай-

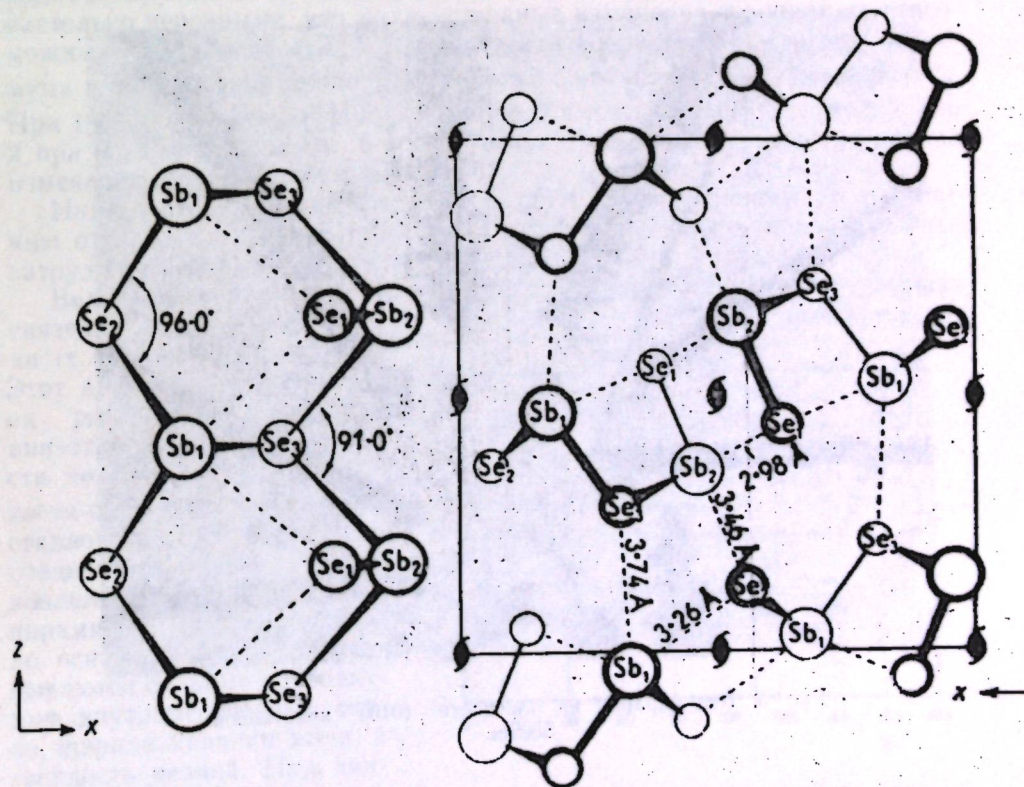


Рис. 1. Проекция двойной цепочки Sb_2Se_3 на плоскость спайности (010).

Рис. 2. Проекция элементарной ячейки Sb_2Se_3 на плоскость (001).

ности и скольжения. По этой причине желательно расширить круг изученных веществ с целью накопления экспериментальных данных. Особый интерес с точки зрения простоты истолкования полученных результатов представляют вещества с сильно выраженной анизотропией химических связей, к числу которых относится Sb_2Se_3 , явившийся предметом исследования настоящей работы.

Кристаллы Sb_2Se_3 относятся к ромбической сингонии (класс $D_{2h}^{16}/[111]$). Они состоят [12] из зигзагообразных цепей двух типов: $\dots - Sb_1 - Se_2 - Sb_1 - \dots$ и $\dots - Se_3 - Sb_2 - Se_3 - \dots$, где комплекс атомов



Sb_1 , Sb_2 , Se_1 , Se_2 и Se_3 можно рассматривать как стехиометрический мотив решетки. Эти цепи образуют одну двойную цепочку, проекция которой на плоскость (010) показана на рис. 1. Параллельно первой двойной цепочке располагается вторая, повернутая на 180° вокруг оси [001] и смещенная вдоль этого направления на $\frac{c}{2}$. Относительное расположение

двух двойных цепочек хорошо видно в центре рис. 2, где приводится проекция элементарной ячейки Sb_2Se_3 на плоскость (001). Транслируя этот рисунок в направлении $\pm [100]$, можно убедиться, что двойные цепочки располагаются слоями, плоскость которых параллельна (010). Связь атомов в пределах одной цепочки, а также между цепочками одного слоя значительно больше связи между соседними слоями. Поэтому кристаллы Sb_2Se_3 обладают весьма совершенной спайностью по (010).

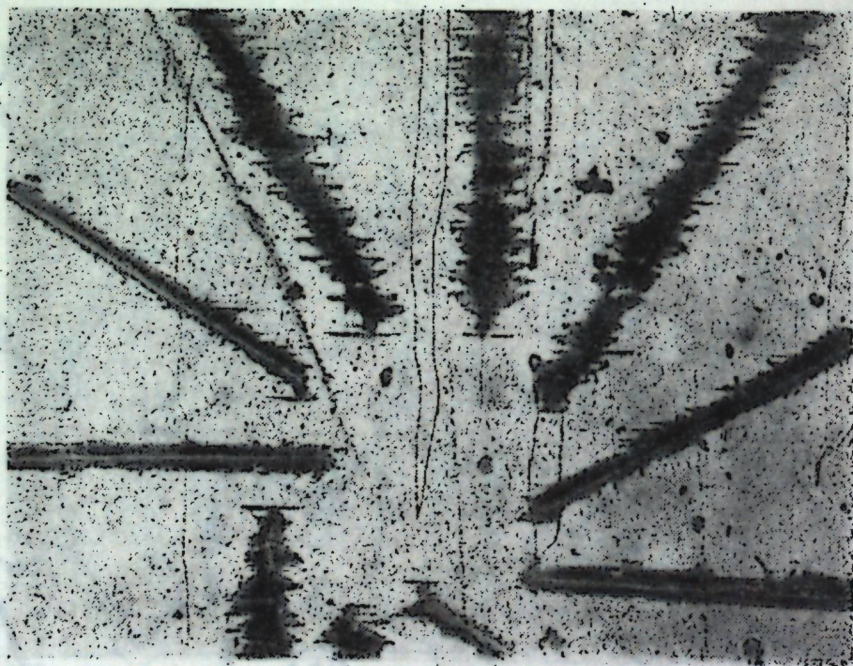


Рис. 3. Вид царапин на плоскости (010) кристаллов Sb_2Se_3 .

В нашем исследовании использовался, в основном, метод царапания, так как ранее [10] было показано, что в этом случае анизотропия микротвердости проявляется более резко. Методика получения кристаллов Sb_2Se_3 [13] и исследования анизотропии микротвердости методом царапания [7—10] описаны в предыдущих работах.

Нами была исследована анизотропия микротвердости на плоскостях (100), (010) и (001), а также фотомеханический эффект на плоскости (010). Полученные при этом результаты приведены на рис. 3—8.

На рис. 3 показан вид царапин на плоскости спайности (010). Здесь ось c направлена вертикально, а ось a — горизонтально. Идущие сверху вниз вдоль оси c неровные линии являются линиями раскола. Различия в ширине царапин и их внешнем виде хорошо заметно на глаз. Царапины, проведенные по направлению $\langle 100 \rangle$, то есть параллельно оси a , имеют ровные края и сравнительно малую ширину. В то же время царапины, идущие вдоль оси c , то есть в направлении $\langle 001 \rangle$, обладают неровными краями и большей шириной. Отметим также, что у краев царапин всех направлений заметны линии, идущие по $\langle 100 \rangle$. Хрупкие трещины, возникающие при царапании вдоль $\langle 001 \rangle$ и близких к нему направлений, также идут параллельно этим линиям. Возможно, последние являются линиями скольжения.

Зависимость микротвердости по царапанию от направления («розетка твердости») на грани (010) показана на следующем рисунке. На нем 0° соответствует царапине, проведенной вдоль [100]. Видно, что вначале микротвердость возрастает, достигая максимума примерно в направлении [301], а затем начинает падать. Одновременно с этим меняется характер царапин, которые от «пластических» все более переходят к «хрупким». В интервале от 70° до 110° края царапин становятся настолько неровными, что количественные измерения их ширины невозможны. Начиная со 110° микротвердость возрастает, достигает максимума в направлении около [301], а затем начинает вновь уменьшаться. При 180° (направление [100]) твердость имеет такую же величину, что и при 0° . Таким образом, в соответствии с симметрией решетки период изменения микротвердости равен 180° .

Интерпретация характера зависимости микротвердости по царапанию от направления на грани (010) кристаллов Sb_2Se_3 представляется затруднительной по следующим причинам.

Величина микротвердости обычно характеризует энергию разрыва связей в направлении, перпендикулярном движению пирамидки (т. е. длине царапины). Этот вывод мы основываем на результатах изучения анизотропии микротвердости по царапанию на плоскости спайности (1010) кристаллов теллура [8]. В последнем случае было установлено, что при движении пирамидки перпендикулярно оси цепочек, когда разрываются сильные ковалентные внутрицепочечные связи, ширина царапины мала, а твердость велика. При движении же индентора вдоль цепочек, когда разрушаются

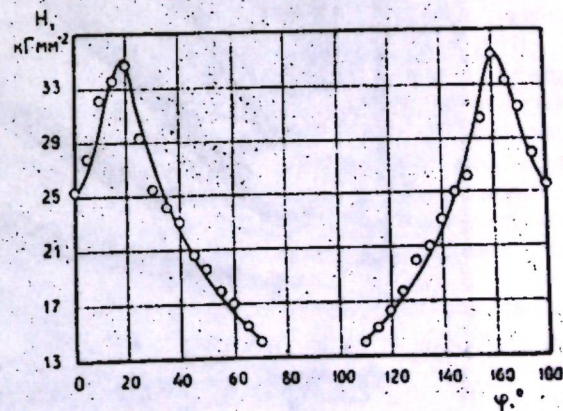


Рис. 4. Зависимость микротвердости по царапанию от направления на грани (010).

значительно более слабые межцепочечные связи, твердость значительно меньше. По аналогии с этими результатами следовало бы заключить, что в Sb_2Se_3 связи вдоль оси a значительно сильнее связей вдоль оси c . Этот вывод как будто бы согласуется с тем, который можно сделать, исходя из внешнего вида царапин. В самом деле, при царапании вдоль $\langle 100 \rangle$, когда разрушаются связи, направленные по $\langle 001 \rangle$, наблюдаются «пластические» царапины с ровными краями, типичные, вообще говоря, для разрыва слабых связей. Наоборот, царапины, проведенные по $\langle 001 \rangle$, которым соответствует разрушение связей, направленных вдоль $\langle 100 \rangle$, имеют «хрупкий» характер, чему, как кажется, должно соответствовать разрушение более сильных связей. Однако это не дает все же достаточных оснований, чтобы заключить, что в Sb_2Se_3 связи по $\langle 001 \rangle$ слабее, чем в направлении $\langle 100 \rangle$, так как рост этих кристаллов происходит по $\langle 001 \rangle$. Таким образом, соображения о соотношении сил связей по $\langle 100 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$ на грани (010), основанные на виде и ширине царапин, с одной стороны, и на особенностях роста кристаллов, с другой, вступают в противоречие.

Возможно, противоречие это лишь кажущееся, обусловленное именно различным характером разрушения при царапании вдоль $\langle 100 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$. Здесь имеется в виду следующее. На примере кристаллов NaCl было показано [7], что в зависимости от угла при вершине индентора на грани (100) могут быть получены как «пластические», так и «хрупкие» царапины, причем соответствующие им «розетки твердости» повернуты относительно друг друга на 45° , так что максимумам твердости, рассчитанной по хрупким царапинам, соответствуют минимумы «пластической твердости» и наоборот (в обоих случаях твердость определялась по формуле $H = P \cdot d^{-2}$, где d — ширина царапины в мм при нагрузке P кг). На основании этих результатов можно предположить поэтому, что если бы пластический характер разрушения на грани (010) в Sb_2Se_3 сохранялся во всех направлениях, то вместо минимума твердости вдоль $\langle 001 \rangle$ наблюдался бы максимум. Вероятно совокупность изложенных выше результатов свидетельствует лишь о том, что

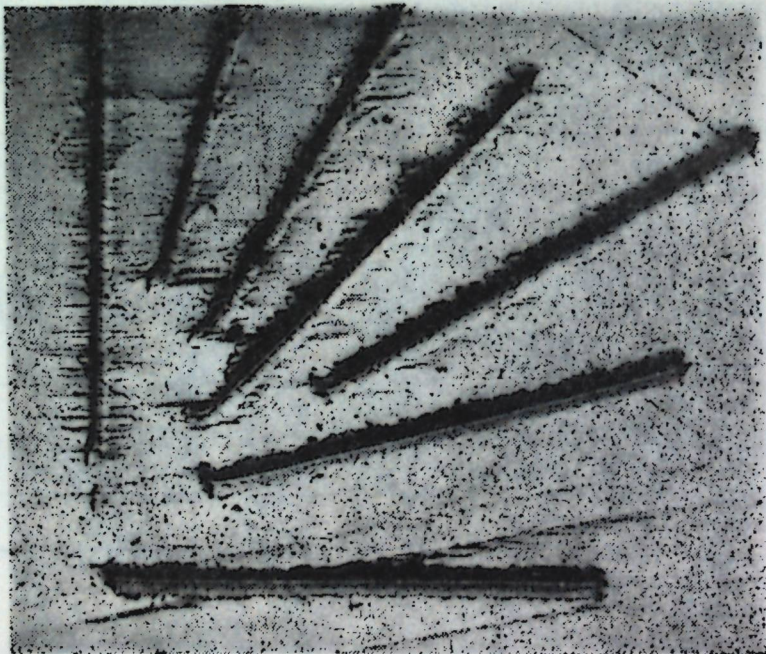


Рис. 5. Вид царапин на грани (001).

скольжение в кристаллах Sb_2Se_3 происходит по плоскости (010) в направлении $\langle 100 \rangle$, что кажется правдоподобным, учитывая особенности кристаллической решетки.

На рис. 5 показан вид ряда царапин на грани (001). Идущая вертикально царапина нанесена вдоль оси b , то есть в направлении $\langle 010 \rangle$. Видно, что при царапании вдоль него наблюдается растрескивание кристалла, причины которого становятся легко понятными, если вспомнить положение плоскости спайности. Несмотря на растрескивание края

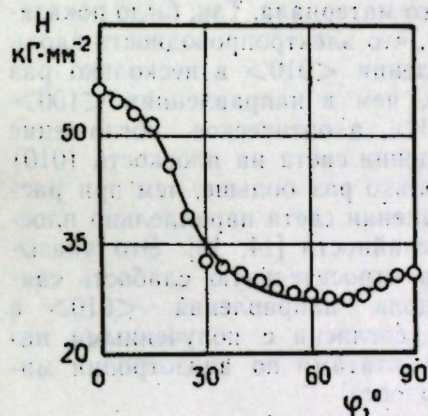


Рис. 6. Анизотропия микротвердости по царапанию на грани (001).

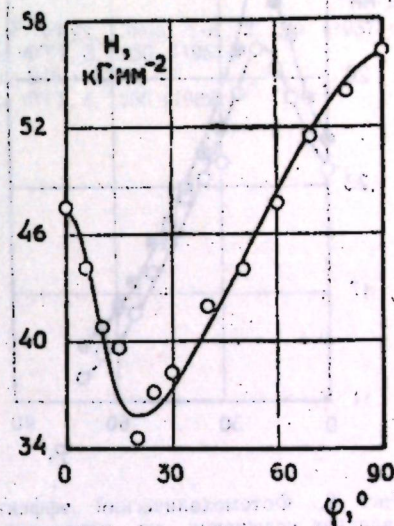


Рис. 7. Анизотропия микротвердости по царапанию на грани (100).

царапин всех направлений имеют довольно четкие границы, и твердость может быть измерена. Зависимость вычисленной по ширине царапин твердости от направления имеет период 180° . На рис. 6 приводится лишь половина периода. Из рисунка следует, что наибольшая твердость наблюдается при царапании вдоль оси b , после чего твердость заметно уменьшается. Этот факт находит простое объяснение. Действительно, царапание по направлению $\langle 010 \rangle$ должно сопровождаться разрушением сильных связей, действующих в плоскости спайности (010), что затрудняет процесс царапания. При этом наблюдаются узкие царапины и большая твердость. Чем меньше угол нанесения царапины по отношению к выходам плоскостей спайности на грань (001), тем легче происходит процесс царапания, тем больше ширина царапины и меньше твердость. Однако минимальное значение твердости наблюдается все же не в направлении $\langle 100 \rangle$, а немного раньше. Возможно, это следует объяснить тем, что плоскости двойных цепочек несколько не совпадают с плоскостью спайности.

Зависимость микротвердости по царапанию от направления на грани (100) приведена на рис. 7. Здесь, как и на предыдущем рисунке, представлена лишь половина периода изменения твердости. 0° соответствует царапина, проведенная вдоль направления $\langle 001 \rangle$, и 90° — вдоль $\langle 010 \rangle$. Вначале твердость убывает, имея минимум примерно при 20° , а затем начинает возрастать, причем второй максимум, расположенный при 90° , значительно больше максимума при 0° . Одновременно меняется

вид царапин: если при 0° они толстые и имеют ровные края, то при 90° царапины значительно тоньше и обладают неровными краями. Наибольшее значение твердости наблюдается при царапании вдоль $\langle 010 \rangle$, то есть перпендикулярно выходам плоскостей спайности на грань (100); и соответствует разрушению сильных связей, действующих в плоскости спайности. Происхождение второго максимума твердости (при 0°) становится понятным, если учесть, что при царапании вдоль этого направления должны разрываться наиболее

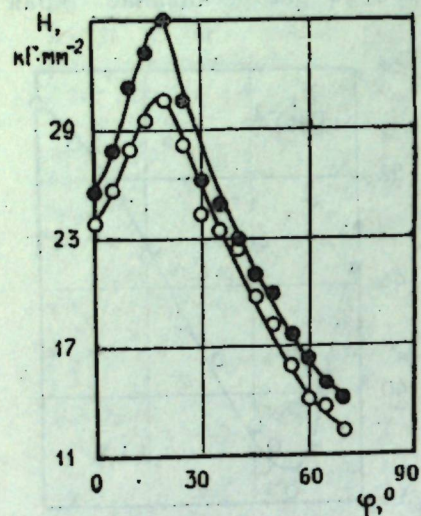


Рис. 8. Фотомеханический эффект (влияние освещения на микротвердость по царапанию) на грани (010) кристаллов Sb_2Se_3 : ● — темновая микротвердость, ○ — микротвердость при освещении.

короткие, а следовательно, и наиболее сильные связи $\text{Se}_1\text{—Sb}_2$ и $\text{Sb}_1\text{—Se}_3$. Слоистая структура кристаллов Sb_2Se_3 отчетливо проявляется также в анизотропии других физических свойств этого материала. Так, было показано [14], что электропроводность вдоль направления $\langle 010 \rangle$ в несколько раз меньше, чем в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$, а оптическое поглощение при падении света на плоскость (010) в несколько раз больше, чем при распространении света параллельно плоскости спайности [14, 15]. Это указывает на относительную слабость связей вдоль направления $\langle 010 \rangle$ в полном согласии с полученными нами результатами по анизотропии микротвердости.

В последние годы в полупроводниках [16—18] и близких к ним веществах [18] обнаружен так называемый фотомеханический эффект (ФМЭ) — уменьшение твердости по вдавливанию при освещении образца. Нам казалось интересным, исследуя анизотропию микротвердости в Sb_2Se_3 , выяснить, обнаруживается ли в этом веществе ФМЭ при царапании. С этой целью твердость по царапанию измерялась как в темноте (рис. 4, 6, 7), так и при освещении тремя кинолампами, создававшими освещенность порядка 35 000 лк.

На рис. 8 приводятся результаты исследования ФМЭ на грани (010). Видно, что во всех направлениях твердость по царапанию при освещении меньше, чем в темноте. Таким образом ФМЭ обнаруживается не только при вдавливании, но и при царапании.

Авторы выражают признательность доценту М. В. Кот за интерес к работе и обсуждение полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. М. С. Аблова и Н. Н. Феоктистова, ФТТ, 5, 364 (1963).
2. М. С. Аблова, ФТТ, 3, 1815 (1961).
3. Р. И. Гарбер, С. Я. Заливадный и Ф. С. Гороховатский, ФММ, 9, 275 (1960).
4. F. Schulz, H. Hanemann, Zs. Metallkunde, 33, 1 (1941).
5. A. R. Kaufmann, P. Gordon, D. W. Lillie, Trans. ASM, 42, 785 (1950).

6. В. Д. Кузнецов, «Физика твердого тела», т. I, Томск, 1937.
7. Ю. С. Боярская, Ученые записки Кишиневского госуниверситета, 17, 159 (1955).
8. Ю. С. Боярская, В. Н. Ланге, Т. И. Ланге, Сб. «Исследования по полупроводникам», Изд-во «Карта Молдовеняскэ», Кишинев, 1964, стр. 64.
9. В. Н. Ланге и Т. И. Ланге, ФТТ, 5, 2029 (1963).
10. В. Н. Ланге и Т. И. Ланге, ФММ, 16, 638 (1963).
11. Б. Ф. Ормонт, «Структуры неорганических веществ», ГИТТЛ, М., 1950.
12. W. W. Tideswell, F. H. Kruse a. F. D. McCullough, Acta Cryst., 10, 99 (1957).
13. М. В. Кот и С. Д. Шутов, Ученые записки Кишиневского госуниверситета, 39, 45 (1959).
14. М. В. Кот и С. Д. Шутов, Сб. «Труды по физике полупроводников», вып. I, Кишинев, 1962, стр. 47.
15. F. Black, E. M. Conwell, L. Seigle, F. Spencer, F. Phys. Chem. Sol., 2, 240 (1957).
16. Н. Я. Горидько, П. П. Кузьменко, Н. Н. Новиков, ФТТ, 3, 3650, (1961).
17. G. S. Kuczynski a. R. H. Hochman, Phys. Rev., 108, 946 (1957).
18. П. П. Кузьменко, Н. Н. Новиков, Н. Я. Горидько, ФТТ, 4, 2656 (1962).

В. Н. ЛАНГЕ, Т. И. ЛАНГЕ, С. Д. ШУТОВ

АНИЗОТРОПИЯ МИКРОДУРИТАЦИИ Sb_2Se_3

Резюме

Ын урма студийерий анизотропией микродуритэций ын кристалеле Sb_2Se_3 се фак конклузий калитативе деспре ориентаря спациале а форцелор де коезиуне.

Ачесте конклузий коинчид ку резултателе обцинуте ын урма студийерий феноменелор електриче ши оптиче.

С. А. МОСКАЛЕНКО, А. В. ЛЕЛЯКОВ

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ВЫРОЖДЕННЫХ ЭКСИТОНОВ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ С ФОНОНАМИ ПРИ ПОСТОЯННОЙ ПОДСВЕТКЕ

Введение

В работе [2] был рассмотрен энергетический спектр экситон-фононной системы в случае, когда конденсация экситонов происходит быстрее, чем рассеяние экситонов на реальных фононах, и раньше, чем успеет произойти понижение экситонного уровня из-за взаимодействия с фононами.

Исходный гамильтониан экситон-фононной системы дается выражением (3) работы [2]. После его разложения по малым операторам экситонов с импульсом, отличным от нуля, и диагонализации квадратичной формы там был получен энергетический спектр $E_s(p)$ фоно-гидронных элементарных возбуждений системы. Члены третьего и четвертого порядка малости служат причиной квантовых переходов у элементарных возбуждений. Они приводят к их взаимным превращениям и к установлению в присутствии постоянной подсветки неравновесного стационарного состояния. Мы учтем лишь члены третьего порядка малости и получим уравнения для функций распределения элементарных возбуждений. Используя связь между последними и функциями распределения для исходных частиц системы, мы получим кинетические уравнения для экситонов и фононов. Наши результаты получаются простым обобщением работ [1].

§ 1: Квантовые кинетические уравнения

Следуя [2], после диагонализации гамильтониан (3) [2] принимает вид:

$$H = E_0 + \sum_{s=1}^2 \sum_{p \neq 0} E_s(p) \xi_{ps}^+ \xi_{ps} + \frac{t}{\sqrt{N_a}} \sum_{pp'} \theta(p-p') \alpha_p^+ \alpha_{p'} \cdot (\beta_{p-p'} - \beta_{p'-p}^+) + \frac{\sqrt{N_0}}{V} \sum_{n_1 p_1 p_2} v(p_1) \Delta_{kp} (p_1 + p_2 - p_3) (\alpha_{p_1}^+ \alpha_{p_2}^+ \alpha_{p_3} + \alpha_{p_3}^+ \alpha_{p_2} \alpha_{p_1}). \quad (1)$$

α_p и β_p являются операторами уничтожения экситонов и фононов соответственно; ξ_{ps} являются операторами уничтожения элементарных возбуждений в системе. Обозначения в (1) такие же, как и в работе [2]. Связь между операторами α_p , β_p и ξ_{ps} следующая:

$$\alpha_p = \sum_{s=1}^2 [u_{ps} \xi_{ps} + \tilde{u}_{ps} \xi_{-ps}^+], \quad (2)$$

$$\beta_p = \sum_{s=1}^2 [v_{ps} \xi_{ps} + \tilde{v}_{ps} \xi_{-ps}^+].$$

Коэффициенты u_{ps} , \tilde{u}_{ps} , v_{ps} , \tilde{v}_{ps} найдены Бобрышевой [3]. После подстановки (2) в (3) найдем

$$H = E_0 + \sum_{sp} E_s(p) \xi_{ps}^+ \xi_{ps} +$$

$$+ \sum_{p_1 p_2} \sum_{sxy=1}^2 S(p_1 s, p_2 x, p_1 + p_2 y) \xi_{p_1+p_2}^+ \xi_{p_1} \xi_{p_2} +$$

$$+ \sum_{p_1 p_2} \sum_{sxy=1}^2 S(p_1 s, p_2 x, p_1 + p_2 y) \xi_{p_1}^+ \xi_{p_2}^+ \xi_{p_1+p_2} +$$

$$+ \sum_{p_1 p_2} \sum_{sxy=1}^2 R(p_1 s, p_2 x, p_1 + p_2 y) \xi_{p_1} \xi_{p_2} \xi_{-(p_1+p_2)}^+ +$$

$$+ \sum_{p_1 p_2} \sum_{sxy=1}^2 R(p_1 s, p_2 x, p_1 + p_2 y) \xi_{-(p_1+p_2)}^+ \xi_{p_1}^+ \xi_{p_2}^+, \quad (3)$$

где

$$S(p_1 s, p_2 x, p_1 + p_2 y) = \frac{\sqrt{N_0}}{2V} [\nu(p_1) u_{p_1 s} u_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} +$$

$$+ \nu(p_1 + p_2) \tilde{u}_{p_1 s} u_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} + \nu(p_1) u_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} + \nu(p_1) \tilde{u}_{p_1 s} u_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} +$$

$$+ \nu(p_1 + p_2) u_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} + \nu(p_1) \tilde{u}_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} + \nu(p_2) u_{p_1 s} u_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} +$$

$$+ \nu(p_1 + p_2) u_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} + \nu(p_2) \tilde{u}_{p_1 s} u_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} + \nu(p_2) u_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} +$$

$$+ \nu(p_1 + p_2) \tilde{u}_{p_1 s} u_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} + \nu(p_2) \tilde{u}_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y}] +$$

$$+ \frac{i}{2\sqrt{N_0}} [\theta(p_1) \tilde{u}_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} (v_{p_1 s} + \tilde{v}_{p_1 s}) + \theta(p_2) u_{p_1 s} u_{p_1+p_2 y} (v_{p_2 x} + \tilde{v}_{p_2 x}) +$$

$$+ \theta(p_1 + p_2) u_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} (v_{p_1+p_2 y} + \tilde{v}_{p_1+p_2 y}) + \theta(p_2) \tilde{u}_{p_1 s} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} (v_{p_2 x} +$$

$$+ \tilde{v}_{p_2 x}) + \theta(p_1) u_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} (v_{p_1 s} + \tilde{v}_{p_1 s}) +$$

$$+ \theta(p_1 + p_2) u_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1 s} (v_{p_1+p_2 y} + \tilde{v}_{p_1+p_2 y})]$$

и

$$R(p_1 s, p_2 x, p_1 + p_2 y) = \frac{\sqrt{N_0}}{2V} [\nu(p_1) u_{p_1 s} u_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} +$$

$$+ \nu(p_1) \tilde{u}_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} u_{p_1+p_2 y} + \nu(p_2) u_{p_1 s} u_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y} + \nu(p_2) \tilde{u}_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} \tilde{u}_{p_1+p_2 y}] +$$

$$+ \frac{i}{2\sqrt{N_0}} [\theta(p_1 + p_2) u_{p_1 s} \tilde{u}_{p_2 x} (v_{p_1+p_2 y} + \tilde{v}_{p_1+p_2 y}) +$$

$$+ \theta(p_1 + p_2) \tilde{u}_{p_1 s} u_{p_2 x} (v_{p_1+p_2 y} + \tilde{v}_{p_1+p_2 y})]. \quad (4)$$

Члены в (3), содержащие три оператора рождения или три оператора уничтожения, не дадут вклада в первое приближение теории квантовых переходов и поэтому рассматриваться не будут. Следуя (15) [16], найдем изменение во времени функции распределения элементарных возбуждений \bar{n}_{ps} из-за столкновений с другими возбуждениями

$$\left(\frac{\partial \bar{n}_{ps}}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = \frac{16\pi}{(2\pi)^3 h^4} \sum_{xy} \int dp' |S(ps, p'x, p+p'y)|^2 \cdot$$

$$\cdot \delta[E_s(p) + E_x(p') - E_y(p+p')] \{ (1 + \bar{n}_{ps})(1 + \bar{n}_{p'x}) \bar{n}_{p+p'y} -$$

$$- (\bar{n}_{p+p'y} + 1) \bar{n}_{ps} \bar{n}_{p'x} \} + \frac{8\pi}{(2\pi)^3 h^4} \sum_{xy} \int dp' |S(ps, p'x, p+p'y)|^2 \cdot$$

$$\cdot \delta[E_x(p') + E_y(p-p') - E_s(p)] \{ (1 + \bar{n}_{ps}) \bar{n}_{p'x} \bar{n}_{p-p'y} -$$

$$- (1 + \bar{n}_{p'x})(1 + \bar{n}_{p-p'y}) \bar{n}_{ps} \}. \quad (5)$$

Функции распределения экситонов и фононов связаны с функциями распределения элементарных возбуждений [2, 3]

$$\bar{N}_{ps} = \sum_s [(u_{ps}^2 + \tilde{u}_{ps}^2) \bar{n}_{ps} + \tilde{u}_{ps}^2] \quad (6)$$

$$\bar{N}_{p\Phi} = - \sum_s [(v_{ps}^2 + \tilde{v}_{ps}^2) \bar{n}_{ps} + \tilde{v}_{ps}^2].$$

Изменения этих функций распределения из-за столкновений равны

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \bar{N}_{ps}\right)_{\text{ст}} = \sum_s (u_{ps}^2 + \tilde{u}_{ps}^2) \left(\frac{\partial \bar{n}_{ps}}{\partial t}\right)_{\text{ст}} \quad (7)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \bar{N}_{p\Phi}\right)_{\text{ст}} = - \sum_s (v_{ps}^2 + \tilde{v}_{ps}^2) \left(\frac{\partial \bar{n}_{ps}}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$$

Учтем теперь тот факт, что в результате столкновений, не сопровождаемых процессами излучательной и безызлучательной аннигиляции, при постоянной температуре и постоянной подсветке общее число экситонов сохраняется. Поэтому

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \bar{N}_{\text{ос}}\right)_{\text{ст}} + \sum_{p \neq 0} \left(\frac{\partial \bar{N}_{ps}}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = 0. \quad (8)$$

Это условие отличается от очевидного следствия уравнения (5)

$$\sum_s \sum_{p \neq 0} \left(\frac{\partial \bar{n}_{ps}}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = 0. \quad (9)$$

Уравнение (8) определяет изменение числа экситонов в конденсате вследствие столкновений. Полные изменения чисел экситонов в и над конденсатом определяются процессами столкновения, зарождения и аннигиляции экситонов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\bar{N}_0}{V} \right) &= \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\bar{N}_0}{V} \right) \right]_{\text{ст}} - \frac{1}{\tau} \frac{\bar{N}_0}{V} - \frac{B \bar{N}_0}{V} \cdot \frac{\bar{N}}{V} \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{p \neq 0} \frac{\partial \bar{N}_{p3}}{\partial t} \right) &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \sum_{p \neq 0} \frac{\partial \bar{N}_{p3}}{\partial t} \right)_{\text{ст}} - \frac{1}{\tau} \sum_{p \neq 0} \bar{N}_{p3} - \\ &- \frac{B}{V} \cdot \frac{\bar{N}}{V} \sum_{p \neq 0} \bar{N}_{p3} + G, \end{aligned} \quad (10)$$

где τ есть время жизни экситонов; B — константа бимолекулярной аннигиляции. G есть число экситонов, созданных в единицу времени в единице объема. Учитывая уравнение (8), найдем кинетическое уравнение для полного числа экситонов.

$$\bar{N}_3 = \bar{N}_{03} + \sum_{p \neq 0} \bar{N}_{p3} \quad (11)$$

$$\frac{\partial \bar{N}_3}{\partial t} = G - \frac{\bar{N}_3}{V} \frac{1}{\tau} - B \left(\frac{\bar{N}_3}{V} \right)^2$$

В стационарных условиях правые части уравнений (10), (11) равны нулю. При этом равенства (8), (10), (11) сводятся к следующему:

$$\begin{aligned} \frac{8\pi V^2}{(2\pi\hbar)^6 \hbar} \sum_{s,xy} \int dp \int dp' |S(ps, p'x, p+p'y)|^2 \cdot \delta [E_s(p) + \\ + E_x(p') - E_y(p+p')] (u_{ps}^2 + u_{p's}^2 + u_{p'x}^2 + u_{p'x}^2 - u_{p+p'y}^2 - u_{p+p'y}^2) \cdot \\ \cdot \{ (1 + \bar{n}_{ps})(1 + \bar{n}_{p'x}) \bar{n}_{p+p'y} - (1 + \bar{n}_{p+p'y}) \bar{n}_{ps} \bar{n}_{p'x} \} = \\ = - \frac{\bar{N}_{03}}{2\tau} \left(1 + \sqrt{1 + 4GB\tau^2} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

Приведем теперь кинетическое уравнение для фононов. Оно аналогично уравнению (11).

$$\frac{\partial}{\partial t} (N_\Phi) = \left(\frac{\partial}{\partial t} N_\Phi \right)_{\text{ст}} + \left(\frac{\partial}{\partial t} N_\Phi \right)_{\text{анниг. эксит.}} - \left(\frac{\partial}{\partial t} N_\Phi \right)_{\text{ст. со ст. ст.}} \quad (13)$$

Первый член определяет изменение числа фононов из-за столкновений с экситонами и другими фононами; второй — из-за процессов безызлучательной аннигиляции экситонов, а третий — приводит к убыли числа фононов из-за столкновения со стенками термостата (поверхности образца). В стационарных условиях правая часть (13) также равна нулю и вместе с (12) определяет стационарные неравновесные функции распределения экситонов и фононов. В то же время вследствие (8) полученные уравнения указывают условия существования конденсата в системе.

Примечание. Из-за конечного времени τ закон сохранения энергии при столкновении выполняется с точностью до $\frac{\tau}{\tau}$. Поэтому целесообразно вместо δ -функции в формулах (5) и (12) использовать регулярную функцию, чей предел при $\tau \rightarrow \infty$ совпадает с δ -функцией.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Н. Боголюбов, Изв. АН СССР, сер. физ. 11, 77 (1947), ЖЭТФ 18, № 7, 622 (1948).
2. С. А. Москаленко, П. И. Хаджи, А. И. Бобрышева, А. В. Леляков, ФТТ 5, № 5, 1444 (1963).
3. А. И. Бобрышева, Изв. АН МССР, 7, 89 (1964).

С. А. МОСКАЛЕНКО, А. В. ЛЕЛЯКОВ

УРАВНЕНИЯ КИНЕТИКИ ПЕНТРУ ЭКСЦИТОНИЙ ДЕЖЕНЕРАЦЬ, КАРЕ ИНТЕРАКЦИОНЯЗЭ КУ ФОНОНИЙ ЫН ПРЕЗЕНЦА ИЛУМИНЭРИИ СТАЦИОНАРЕ

Резюме

Се дедук уравнения кинетики пентру экситоний деженераций, каре интеракционязэ ку фононий. Се констатэ казул уней конденсаций «рапиде» ши легатурий слабе ку фононий ку ажуторул методей дезволтате де Боголюбов ын теория супракондуктивитэций. Екзистенца луминэрий стационаре се я ын сямэ феноменоложик.

В. В. СОБОЛЕВ

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЗОН КРИСТАЛЛОВ ГРУПП IV и III—V

Введение

В настоящей работе рассматриваются экспериментальные и теоретические данные, связанные с новой областью спектроскопии — спектроскопией твердого тела для точек зон Бриллюэна (з. Б.), существенно отличающихся от центра з. Б.

Структура зон проводимости и валентных зон кристаллов в \bar{K} пространстве очень сложна. Знание зависимости $E(\bar{K})$ (особенно знание экстремальных значений энергии) в сложной структуре зон принципиально важно как для развития теории твердого тела, так и для сознательного подхода в выборе веществ в научных и прикладных применениях (лазеры, фотоприемники и др.), а также для понимания многих свойств кристаллов (электрических, оптических, фотоэлектрических и др.).

Исследованию энергетической структуры зон кристаллов посвящено большое количество работ [1, 2, 6]. Однако большинство этих работ ограничивается узкой областью энергий, близких к краю собственного поглощения. Лишь в последние годы в связи со значительным развитием полупроводниковой электроники [3] и теории твердого тела [4, 5], когда обнаружилась настоятельная необходимость знания детальной зонной структуры кристаллов при любых значениях \bar{K} , появляются экспериментальные оптические исследования в большом интервале энергий для $E > E_g$ [6—12].

Методы изучения структуры зон твердых тел делятся в основном на две группы: а) Исследование гальвано-магнитных свойств и влияние на них давления и температуры; область применений ограничена зоной проводимости; сведения ценные, но косвенные и не очень точные.

б) Исследование оптических свойств в области энергий $E \leq E_g$ и влияния на них давления и температуры; область применений ограничена окрестностью $K = (0, 0, 0)$; сведения прямые и очень точные; можно определить величины E_g и расстояния между подзонами в сложной структуре зон валентных и проводимости (последние — по инфракрасным спектрам поглощения [1]) [2, 6].

В 1960 году Филлипс [13] впервые четко поставил вопрос о возможности и плодотворности экспериментального изучения структуры зон кристаллов для любых точек з. Б. с помощью спектров отражения кристаллов (на основании экспериментальных работ [14]).

В противоположность спектрам поглощения, которые часто не могут быть применены в области спектра $E > E_g$ ($K = 10^5 - 10^6$ см⁻¹, поэтому

требуются слишком малые толщины кристаллов $d \approx 100 \text{ \AA}$)¹, спектры отражения могут быть использованы в широкой области длин волн.

Несмотря на очевидные преимущества и широкие возможности использования спектров отражения для изучения расположения энергетических уровней кристаллов, методика спектров отражения стала при-

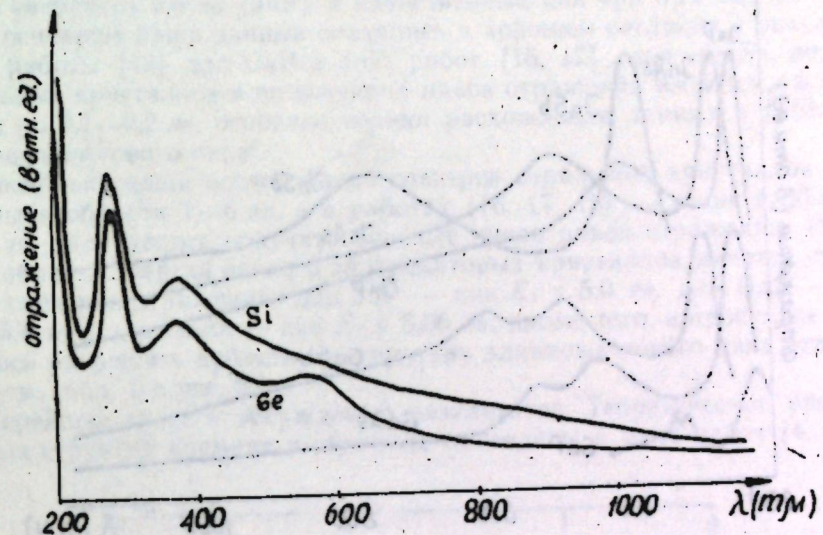


Рис. 1. Спектры отражения кристаллов Si и Ge.

меняться лишь совсем недавно в связи с интенсивным развитием теоретических расчетов зон и назревшей необходимостью знания структуры зон полупроводников и сразу же позволила получить весьма ценные результаты по структуре зон Si и Ge [13—15]. Так же как первые экситонные исследования привели к созданию «краевой спектроскопии» (т. е. спектроскопии вблизи $K = (0, 0, 0)$), так и работы [14, 13] послужили началом создания спектроскопии твердого тела для любых значений \bar{K} (см. работы Тауца и Антончика [16], Тауца и Абрагама [17], Кардоны [18])².

Экспериментальные данные по спектрам отражения монокристаллов Ge, Si, JnP, JnAs, JnSb, GaP, GaAs, GaSb и их обсуждение³

Вначале нами были изучены спектры отражения монокристаллов Si и Ge⁴ (рис. 1): обнаружены максимумы отражения для кремния у 4,51 и 3,40 эв, а для германия у 4,43; 3,35 и 2,22 эв, а также подъемы кривых

¹ Для большинства монокристаллов удается получить толщину d , не меньшую примерно 5 микрон (монокристаллы II—VI из-за методики выращивания имеют $d \approx 0,1 - 100$ микрон). Пленки часто не позволяют выявить важные детали спектров поглощения из-за своих несовершенств; пленки стехиометрического состава для многих соединений вообще получить очень трудно.

² Одновременно и независимо от них нами с начала 1959 года были предприняты исследования спектров отражения и поглощения в области 1—6 эв кристаллов групп IV, III—V, II—VI, II—V, группы PbS, селена, теллура, кристаллов типа Bi_2S_3 и др. [7—12].

³ Автор глубоко благодарен проф. Д. Н. Наследову, проф. Н. А. Горюновой, проф. Б. Т. Коломийцу, проф. В. М. Тучкевичу, А. Я. Нашельскому и их сотрудникам за любезное предоставление кристаллов.

⁴ В измерениях принимали участие Н. Т. Лазовская и Н. Н. Сырбу.

отражения для $\lambda < 2200 \text{ \AA}$. Определенные нами положения максимумов отражения Si и Ge находятся в хорошем согласии с данными Филиппа и Тафта [14] за одним исключением; пик отражения Ge у $3,35 \text{ эв}$, по нашим данным, четко выражен в противоположность слабому намеку на пик отражения у $3,5 \text{ эв}$ в работе [14]. (см. также работы [19]).

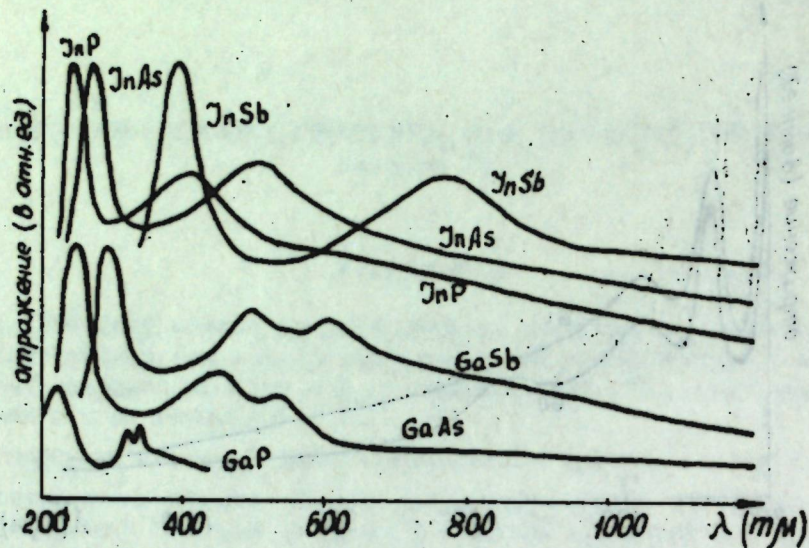


Рис. 2. Спектры отражения кристаллов InP, InAs, InSb, GaP, GaAs и GaSb.

Исследованные нами спектры отражения шести монокристаллов группы III—V — JnP, JnAs, JnSb, GaP, GaAs и GaSb — оказались очень схожими между собой: один интенсивный пик в области $\lambda \lambda 200\text{—}400 \text{ мкм}$ (λ_1, E_1) и второй, более широкий и менее интенсивный, в области $\lambda \lambda 400\text{—}700 \text{ мкм}$ (λ_2, E_2 и λ_3, E_3); в кристаллах GaP, GaAs и GaSb длинноволновый максимум отражения получен в виде дублета (см. рис. 2 и табл. 1).

Таблица 1

Величины максимумов отражения (в мкм и в эв) и E_g (в эв) кристаллов группы III—V при 290° K .

Кристалл	λ_1	E_1	λ_2	E_2	λ_3	E_3	E_g
In P	248	5,0	400	3,1	—	—	1,30
In As	270	4,6	500	2,48	—	—	0,33
In Sb	390	3,18	740	1,68	—	—	0,18
Ga P	230	5,4	320	3,88	335	3,70	2,6
Ga As	245	5,06	440	2,82	580	2,14	1,41
Ga Sb	290	4,28	490	2,53	600	2,07	0,80

Одновременно с нами в работах [16, 17] были изучены спектры отражения кристаллов GaAs, GaSb, JnAs, JnSb в области $1,5\text{—}5 \text{ эв}$: обнаружены пики отражения при $\sim 3,1 \text{ эв}$ (GaAs), $\sim 2,2$ и $4,22 \text{ эв}$

(GaSb), $\sim 2,7$ и $4,72 \text{ эв}$ (JnAs), $\sim 2,1$ и $4,13 \text{ эв}$ (JnSb); дублетное расщепление длинноволнового пика отражения оказалось равным $0,26$; $0,48$; $0,29$ и $0,56 \text{ эв}$, соответственно. Позднее в работе [18] были изучены кристаллы GaP и JnP: обнаружены пики отражения при $3,15 \text{ эв}$ и (не очень уверенно) $5,0 \text{ эв}$ (JnP) и единственный пик при $3,71 \text{ эв}$ для GaP.

В основном наши данные оказались в хорошем согласии с результатами работы [18] для GaP и JnP; работ [16, 17] для GaSb, но для остальных кристаллов в положениях пиков отражения имеются расхождения до $0,1\text{—}0,2 \text{ эв}$; особенно велики расхождения данных в JnSb для ультрафиолетового пика⁵.

Поскольку наши исследования спектров отражения кристаллов проведены в области $1\text{—}6 \text{ эв}$, а в работах [16, 17, 18] — лишь в области $1\text{—}5 \text{ эв}$, нам удалось получить большее число пиков отражения. Именно в области энергий около 5 эв у некоторых кристаллов имеется структура спектров отражения: для JnP — пик E_1 у $5,0 \text{ эв}$, для GaP — пик E_1 у $5,4 \text{ эв}$ и для GaAs — пик E_1 у $5,06 \text{ эв}$; кроме того, в кристалле GaP удалось разрешить дублетную структуру длинноволнового пика отражения (см. табл. 1 и рис. 2).

Перейдем далее к обсуждению результатов. Теоретические расчеты зонных структур кремния и германия проведены в ряде работ [4, 5, 13,

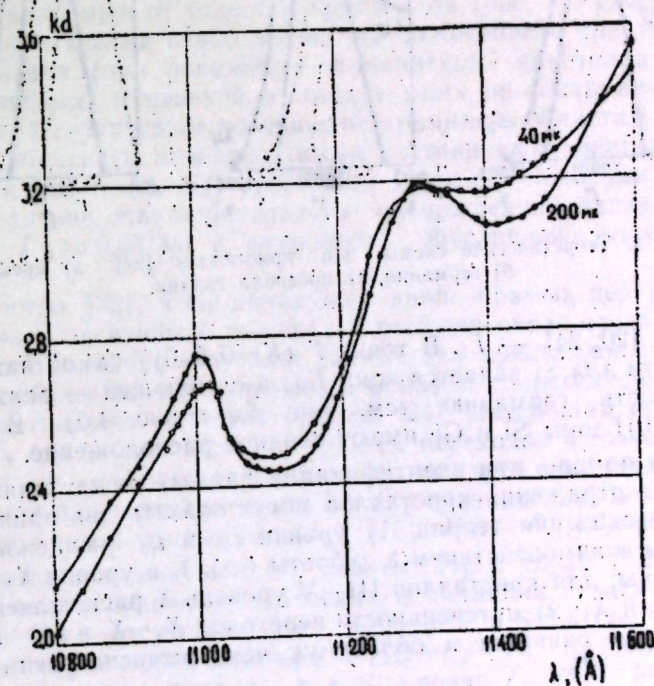


Рис. 3. Спектры поглощения монокристаллов кремния: при $T=77,3^\circ \text{ K}$ ($d=40$ и 200 микрон).

[15, 20—25, 34]. В настоящее время для Ge в направлениях $K=(1,1,1)$, $K=(1,0,0)$ и $K=(0,0,0)$ с большой точностью теоретически рассчитаны расположения трех верхних валентных зон и трех нижних зон прово-

⁵ Недавно [26] получены результаты для JnSb, подтверждающие наши данные. В настоящее время нами проводятся дальнейшие исследования кристаллов группы III—V для установления более точных значений пиков отражения и выявления деталей сложной структуры.

димости (рис. 4, б); для кремния имеются расхождения, в основном относящиеся к зоне проводимости в точке L [$K = (1, 1, 1)$]: в одних работах [23, 15] самой нижней зоной проводимости получается L_3 , в других

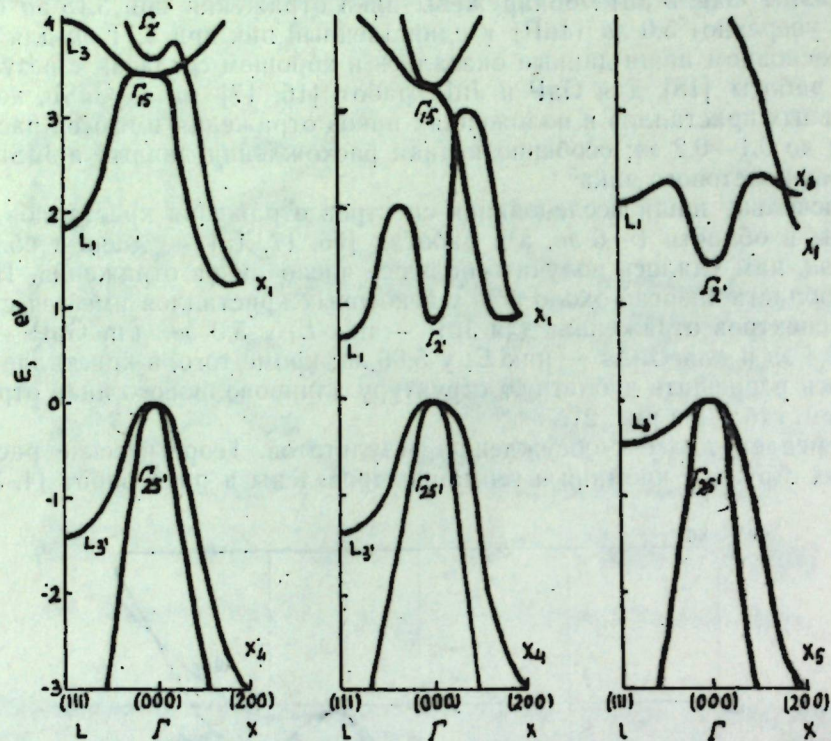


Рис. 4. Теоретические схемы зон кристаллов [24]: а) кремния, б) германия, в) арсенида галлия.

же работах [20, 24] — L_1 . В точке Γ ($K = 0, 0, 0$) самой нижней зоной проводимости для Si является зона Γ_{15} , а следующей — зона Γ_2 , в противоположность германию (см. рис. 4, а и рис. 4, б). В точке X [$K = (1, 0, 0)$] зоны Si и Ge имеют сходное расположение.

Большую помощь при идентификации прямых междузонных переходов с пиками отражения кристаллов могут оказать два принципиально важных предсказания теории: 1) уровни $L_{3'}$ и L_3 расщеплены спин-орбитальным взаимодействием в дублеты (Δ_{co}), а уровни X_4 и X_1 почти не расщеплены; для кристаллов III—V уровень X расщепляется на два уровня — X_3 и X_1 ; 2) интенсивности переходов X_4 — X_1 и $L_{3'}$ — L_3 должны быть примерно равными и большими, чем интенсивности переходов $L_{3'}$ — L_1 и $\Gamma_{25'}$ — Γ_2 .

В хорошем согласии с теорией можно предположить, что для кристалла германия пик отражения у $2,22 \text{ эВ}$ (имеющий дублетную структуру [16]) соответствует прямым междузонным переходам в точке L ($L_{3'}$ — L_1), пик отражения у $4,43 \text{ эВ}$ — переходам в точке X (X_4 — X_1), а пик отражения у $3,35 \text{ эВ}$ — переходам в точке Γ ($\Gamma_{25'}$ — Γ_{15}) [7, 21].

В случае кремния аналогичное надежное сопоставление провести труднее: 1) возможное спин-орбитальное расщепление уровней в точке L имеет слишком малую величину, чтобы быть обнаруженным на опыте; 2) в твердых растворах Ge—Si пик отражения у $2,2 \text{ эВ}$ монотонно смещается в область больших энергий до состава с 80% Si, а да-

лее скачком переходит к положению у $3,4 \text{ эВ}$, характерного для чистого Si; 3) в противоположность германию в кремнии не удается обнаружить до сих пор ни магнито-оптические осцилляции [32], ни экситонное поглощение.

По предложению Е. Ф. Гросса в 1954—1958 годах нами были приняты оптические исследования по обнаружению экситонных состояний в кристаллах кремния. Для этого нами была собрана регистрирующая спектральная самодельная установка с большой дисперсией и светосилой ($D = 3 \text{ \AA/мм}$ во втором порядке эшелетты с заштрихованной поверхностью $150 \times 146 \text{ мм}^2$; относительное отверстие 1:15; приемник света — инфракрасный фотоумножитель ФЭУ-22, охлаждаемый жидким азотом; записывающее устройство — потенциометр ЭПВ-51). Спектры преломления монокристаллов Si высокой чистоты и различных толщин ($d = 5$ —500 микрон) изучались при $T = 290^\circ, 77^\circ, 160^\circ$ и $4,2^\circ \text{ К}$ в спектральной области $1,3$ — $0,6$ микрон.

В результате тщательно проведенных экспериментов на монотонном ходе спектрального распределения коэффициента поглощения монокристаллов кремния никакой экситонной структуры нам обнаружить не удалось. В области $\lambda \approx 1,1$ микрона найдены две слабые полосы поглощения при $\lambda 11320 \text{ \AA}$ и $\lambda 11025 \text{ \AA}$, коэффициент поглощения которых оказался независимым от толщины кристаллов (рис. 3); изменение температуры также весьма слабо влияет на положение в спектре и величину поглощения (при понижении температуры кристалла от 290 до $4,2^\circ \text{ К}$ существенных изменений в спектре нами не обнаружено). Обнаруженное нами структурное поглощение кремния в области $1,1$ микрона естественно объяснить поверхностными состояниями кристаллов (примесными или экситонными); расстояние между полосами ($0,03 \text{ эВ}$) близко к величине спин-орбитального расщепления валентной зоны Si [$\Delta_{co}(\text{Si}, \Gamma) \approx 0,04 \text{ эВ}$] и, возможно, обусловлено этим расщеплением.

Как известно [32], в Ge обнаружен край прямых переходов в области $0,82 \text{ эВ}$ и экситонные полосы поглощения около этого края.

Нам представляется, что наши данные для кристаллов кремния могут быть наиболее непротиворечивым образом сопоставлены с результатами теоретических расчетов работы [24] следующим образом: пик отражения у $4,51 \text{ эВ}$ соответствует прямым переходам в точке X (X_4 — X_1), а пик у $3,4 \text{ эВ}$ — скорее всего перекрытию трех областей переходов из-за близости их энергий в точках L и Γ и сравнительно больших полуширин самих пиков отражения ($L_{3'}$ — L_1 , $\Gamma_{25'}$ — Γ_{25} , $\Gamma_{25'}$ — Γ_2) [7].

На основе схем зон Si и Ge работы [24] в точке Γ можно легко объяснить наличие магнито-оптических осцилляций и экситонного поглощения в Ge и отсутствие этих эффектов в Si: в Ge уровень Γ_2 поглощения в Ge и отсутствие этих эффектов в Si: в Ge уровень Γ_2 имеет резко выраженный минимум и $\Delta E = \Gamma_2$ — $\Gamma_{25'}$ близко к E_g (уровень Γ_{15} расположен высоко), а в Si уровни Γ_{15} и Γ_2 не имеют достаточно резко выраженных минимумов и $\Delta E = \Gamma_{15}(\Gamma_2)$ — $\Gamma_{25'}$ гораздо больше E_g (рис. 4)⁶.

Таким образом, для кристалла Ge определены четыре прямых и один непрямой междузонные переходы (при $T = 290^\circ \text{ К}$): $E_g = L_1$ — $\Gamma_{25'}$ =

⁶ В работах [35] «ступенчатый» ход краевого поглощения кристаллов Ge и Si имеет весьма одинаковый характер и объясняется с привлечением экситонов. Сопоставление экспериментальных данных работ [35], с одной стороны, и наших опытных данных по краю поглощения Si, теоретических расчетов зон [24] и всей совокупности оптических данных для Si и Ge, с другой стороны, привело нас к выводу о том, что «ступенчатая» зависимость краевого поглощения этих двух кристаллов может быть и не связанной с экситонными эффектами.

$=0,67$ эв; $\Gamma_{2'} - \Gamma_{25'} = 0,82$ эв; $X_1 - X_4 = 4,43$ эв, $L_1 - L_{3'} = 2,22$ эв; $\Gamma_{15} - \Gamma_{25'} = 3,35$ эв. Отсюда легко определить отдельно относительное расположение уровней в зоне проводимости и в валентной зоне Ge: уровень $\Gamma_{2'}$ и уровень Γ_{15} расположены выше уровня L_1 на $0,15$ эв и $2,70$ эв, соответственно; уровень $L_{3'}$ расположен ниже уровня $\Gamma_{25'}$ на $1,50$ эв ($\Gamma_{25'} - X_4 = 3,4$ эв?). Аналогичные оценки в расположении зон можно провести и для кремния.

Энергетическая структура зон соединений группы III—V очень похожа на зонную структуру кристаллов группы IV, особенно германия (23, 24, 27, 34) (рис. 4в)⁷. Единственное существенное отличие зонных структур Ge и III—V состоит в том, что во всех соединениях III—V (за исключением AlSb и GaP, у которых минимум зоны проводимости в направлении $K = (1, 0, 0)$ ниже минимума при $K = (0, 0, 0)$ на $0,3$ и $0,4$ эв, соответственно) минимум зоны проводимости, определяющий значение E_g , находится близко к точке Γ ($\Gamma_{2'}$). Это сильно облегчает надежное установление природы пиков отражения в кристаллах группы III—V; длинноволновый пик отражения, во многих кристаллах разрешаемый в дублет, обусловлен переходами в точке L ($L_{3'} - L_1$), причем $L_{3'}$ — дублет из-за спин-орбитального взаимодействия, как и в Ge; коротковолновый пик отражения вызван переходами в точке X ($X_4 - X_1$); переходы в точке Γ ($\Gamma_{25'} - \Gamma_{2'}$) непосредственно приводят к длинноволновому краю собственного поглощения, определяющего величину E_g .

В связи с тем, что для определения природы структуры спектров отражения кристаллов группы IV, III—V важны спин-орбитальные взаимодействия, остановимся на результатах работы [25] для Si и Ge. Влияние спин-орбитальной связи на оптические свойства полупроводников определяется происхождением краев зон проводимости и валентных зон. В кристаллах, имеющих края зон P атомной симметрии, под действием спин-орбитальных взаимодействий P зоны расщепляются (кристаллы групп IV, III—V, II—VI и др.) и вырождение зон частично снимается. Методом ОПВ в предположении $\Delta_{co} \ll E_g$ Ли теоретически рассчитал величины Δ_{co} для разных точек з.Б. кристаллов Si и Ge. При этом оказалось, что так как большая часть матричных элементов в уравнении для спин-орбитального расщепления кристалла может быть выражена через спин-орбитальные расщепления атомного остатка, то валентные спин-орбитальные расщепления в кристалле могут быть удобно получены через линейную комбинацию расщеплений состояний атомного остова. Например, для точки $\Gamma_{25'}$ Ли получил для спин-орбитального расщепления кристалла выражение

$$\Delta_{co}(\Gamma_{25'}) \approx \theta_{2p} \Delta_{2p} + \theta_{3p} \Delta_{3p} - \frac{3}{5} \theta_{3d} \Delta_{3d}, \quad (1)$$

где Δ_{2p} , Δ_{3p} , Δ_{3d} — спин-орбитальные расщепления атомных состояний $2p$, $3p$, и $3d$, а θ_{2p} , θ_{3p} , θ_{3d} — постоянные; подсчет постоянных показал, что величина Δ_{co} на 90 — 95% определяется расщеплением лишь одного из состояний — это существенно упрощает сопоставление данных о расщеплениях в атомах и в кристаллах. По расчетам Ли, в кристаллах $\Delta_{co}(\text{Si}, \Gamma_{25'}) = 0,042$ эв и $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma_{25'}) = 0,29$ эв — в хорошем согласии с опытом [32, 42, 33, 16]: $0,0441$ и $0,3$ эв, соответственно. Из спектроскопических опытных данных известны величины спин-орбитального расщепления атомов Si и Ge: для конфигурации германия

⁷ В кристаллах группы III—V имеется ряд отличий из-за отсутствия инверсионной симметрии в них по сравнению с Ge и Si, но это может привести лишь к появлению дополнительной тонкой структуры зон.

$4s^2 4p^2 3p \Delta_{4p} = 0,18$ эв, для конфигурации кремния $3s^2 3p^2 3p \Delta_{3p} = 0,28$ эв. Сопоставление энергий спин-орбитальных расщеплений в атомах и кристаллах Si и Ge показывает, что для точки $\Gamma_{25'}$ валентной зоны обоих кристаллов величина Δ_{co} больше, чем величина расщепления атомов, при этом в одинаковое число раз: в $1,6$ — $1,7$ раз. Физически это различие между расщеплениями в атомах и в кристаллах Ли объясняет сжатием волновых функций в кристалле относительно атома.

Ли показал, что $\Delta_{co}(\text{Si}, X_4) = \Delta_{co}(\text{Si}, \Gamma_{25'}) = 0$, а $\Delta_{co}(\text{Si}, \Gamma)$ достигает значения $0,042$ эв не при $K = (0, 0, 0)$, а лишь вблизи центра з. Б.

У германия $\Delta_{co}(X_4)$ очень мало, хотя и больше, чем в Si. Теоретически Ли получил далее, что $\Delta_{co}(\text{Ge}, L_{3'}) = 0,18$ эв, а $\Delta_{co}(\text{Ge}, L_3) = 0,01$ эв.

Казалось бы, работой Ли [25] решается однозначно вопрос и о природе происхождения, и о методах расчета энергий спин-орбитальных расщеплений кристаллов, поскольку его результаты легко перенести на кристаллы группы III—V и другие кристаллы. Кейн [39] предложил следующую формулу для расчета величин $\Delta_{co}(\Gamma)$ соединений группы III—V:

$$\Delta_{co}(\Gamma) = a [x_{III} \Delta_{III} + (1 - x_{III}) \Delta_V], \quad a = \frac{\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma)}{\Delta_{3p}(\text{Ge})}, \quad (2)$$

где $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma)$, $\Delta_{3p}(\text{Ge})$, Δ_{III} , Δ_V — величины спин-орбитальных расщеплений кристалла Ge в точке Γ , атома Ge, атома III группы и атома V группы соответственно, а x_{III} и $(1 - x_{III})$ — доли времени нахождения валентного электрона около III и V атомов, соответственно. Если считать, что в соединениях III—V в центре з.Б. валентный электрон проводит 35% своего времени около III атома и 65% — около V атома, то по известным данным о Δ_{III} , Δ_V , $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma)$ и $\Delta_{3p}(\text{Ge})$ и формуле (2) можно рассчитать величины $\Delta_{co}(\Gamma)$, что и сделано Кейном в работе [38] (см. табл. 2, столбцы № 1 и № 5)⁸.

В противоположность Ли и Кейну Кардона [18] предложил другой метод расчета по формуле (2): энергии спин-орбитальных расщеплений в (2) брать не вообще для атомов, а для соответствующих ионов (см. табл. 2, столбцы № 2 и № 6) при том же значении x_{III} . По аналогии с германием принимается, что $\Delta_{co}(\Gamma) \approx 1,5 \times \Delta_{co}(L)$.

Величина нормирующего множителя a в (2) в центре з. Б. по Кейну (для атомов) равна $1,45$, по Кардоне (для ионов) — $0,78$, по Ли (для атомов) — $1,67$. При расчете величины a Кардона принял свое опытное значение для $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma) = 0,27$ эв (по Тауцу и Абрагаму [17] $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma) = 0,30$ эв); Кейн принял $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma) = 0,29$ эв и Δ_{co} (атома Ge) = $0,20$ эв (по расчетам Ли и спектроскопическим данным Δ_{co} (атома Ge) = $0,18$ эв). Исходя из величин $\Delta_{co}(\text{Ge}, \Gamma) = 0,30$ эв и Δ_{co} (атома Ge) = $0,18$ эв и известных данных о значениях величин Δ_{III} и Δ_V для атомов и ионов [38, 18], нами были проведены по формуле (2) расчеты величин $\Delta(\Gamma)$ и $\Delta(L)$ кристаллов IV и III—V на основе спин-орбитальных расщеплений атомов (см. табл. 2, столбцы № 1 и № 5, величины в скобках) и ионов (см. табл. 2, столбцы № 3 и № 7). В столбцах № 4 и № 8 табл. 2 помещены опытные данные со ссылками работ по инфракрасным спектрам поглощения — величины без скобок: в скобках — величины $\Delta_{co}(\Gamma) = 1,5 \times \Delta_{co}(L)$ и $\Delta_{co}(L) = 0,67 \times \Delta_{co}(\Gamma)$, вычисленные из опытных значений $\Delta_{co}(L)$ или $\Delta_{co}(\Gamma)$.

⁸ Вопросы, связанные с величиной x_{III} и природой химической связи соединений III—V, разбираются в работах [27—31].

Сопоставление расчетных данных Кейна, Кардоны и наших данных с экспериментальными (табл. 2) показывает, что наши расчеты на основе ионов несколько лучше согласуются с опытом, чем расчеты Кейна и Кардоны. Расхождения с опытными данными особенно велики для Sn (0,17—0,30 эв по Кейну и 0,08 эв по Кардоне), GaSb (0,09—0,2 эв по Кейну и 0,11 эв по Кардоне), JnSb (0,05—0,2 эв по Кейну и 0,14 эв по Кардоне), т. е. для кристаллов с $\Delta_{co}(\Gamma) \geq 0,7$ эв в противоположность кристаллам с $\Delta_{co}(\Gamma) \leq 0,4$ эв, для которых нет заметных различий между расчетными данными на основе атомов и ионов⁹.

Расчеты по формуле (2) и соотношению $\Delta_{co}(\Gamma) = 1,5 \times \Delta_{co}(L)$ могут дать лишь полуколичественные сведения и встречаются много возражений при детальном анализе данных:

1. По опытным данным величина $\Delta(L) : \Delta(\Gamma)$ равна только для Ge 0,64, а для AlSb и GaAs — 0,53 и 0,79, соответственно.

2. Какова величина X_{III} ?

Принятое во многих работах значение $X_{III} = 0,35$ (т. е. \approx величине эффективного ионного заряда) является грубым приближением, так как спин-орбитальное расщепление обусловлено не валентными электронами, а более глубокими электронами. Однако природа химической связи соединений должна влиять на величину Δ_{co} в кристалле.

3. В расчетах на основе атомов величина Δ_{co} для кристалла больше, чем для атома, а в расчетах на основе ионов наоборот: Δ_{co} для кристалла меньше, чем для иона. Какая модель более правильная? Это неясно даже качественно.

Необходимо отметить, что отсутствие опытных данных по внутри- и междузонным переходам для многих кристаллов также пока сильно затрудняет проведение детальных количественных расчетов величин Δ_{co} (см. табл. 2, столбцы № 11 и № 12 — вычисленные нами приближенные величины инфракрасных внутризонных переходов в валентной зоне кристаллов). Из табл. 2 видно, что лишь в JnSb и Sn нельзя практически обнаружить дублетную структуру валентных зон через и.к. переходы; во многих кристаллах величины $\Delta(\Gamma)$ и $\Delta(L)$ лежат в ближней и.к. области.

Сложную структуру валентных зон можно обнаружить также по оптическим переходам электронов из нижних валентных зон в зоны проводимости (сравни данные табл. 2, столбцы № 9 и № 10) [12, 40].

Между энергиями прямых междузонных переходов соединений изоэлектронных рядов в точке Γ имеется следующее соотношение [49]:

$$E_0 = E_{IV} (1 + 2A \lambda^2 E_{IV}^{-1})^{1/2}, \quad (3)$$

где E_0 и E_{IV} — энергии переходов соединений групп III—V (II—VI, I—VII) и IV, соответственно, а A и λ — константы ($\lambda = 0,1, 2, 3$ для соединений групп IV, III—V, II—VI, I—VII, соответственно). Эта формула получена в предположении, что начальные и конечные состояния взаимодействуют через антисимметричный потенциал; всеми другими взаимодействиями пренебрегается. При $E_{IV} \gg A\lambda^2$ соотношение (3) между E_0 и E_{IV} принимает вид известной формулы Германа [47].

⁹ Нами проведены расчеты Δ_{co} (JnSb, Γ) на основе данных о Sn по (2), но предполагаемого лучшего согласия с опытом получить не удалось.

Таблица 2
Расчетные и опытные данные величин $\Delta(\Gamma), \Delta(L), E_g(\Gamma), E_g(L) + \Delta(\Gamma)$ в эв и $\Delta(\Gamma), \Delta(L)$ в микронах для кристаллов групп IV и III—V

№ строки	№ столбца	Кристалл	$\Delta(\Gamma)$				$\Delta(L)$				Наши расчеты					Δ зон проб-ти
			расчет Кейна	расчет Кардоны	наш расчет	опытные данные	расчет Кейна	расчет Кардоны	наш расчет	опытные данные	$E_g(\Gamma)$	$E_g(\Gamma) + \Delta(\Gamma)$	$\Delta(\Gamma)$	$\Delta(L)$		
1	0	S	0,04 (0,046)	0,045	0,052	0,044 [32,43]	0,03	0,035	0,035	(0,03)	3,4	3,44	28	41	1,6; 0,54	
2	0	Ge	0,29 (0,33)	0,27	0,30	0,30 [42]	0,19 (0,22)	0,20	0,20	0,19 [16]	0,82	1,1	4,1	6,5	3,6; 0,5	
3	0	Sn	0,87 (1,0)	0,62	0,70	0,70	0,58 (0,67)	0,47	0,47	0,47 [37]	0,08	> 0,9	(1,8)	(2,6)	?	
4	0	AlP	0,05 (0,057)	0,06	0,07	—	0,03 (0,035)	0,05	0,05	—	3,0	3,05	25	31	?	
5	0	AlAs	0,29 (0,33)	0,27	0,29	—	0,19 (0,22)	0,19	0,19	—	2,2	2,5	4,3	6,5	?	
6	0	AlSb	0,76 (0,87)	0,57	0,63	0,75 [38,45]	0,51 (0,59)	0,42	0,38	0,40 [38]	1,6	2,35	1,65	3,1	3; 0,5	
7	0	GaP	0,10 (0,115)	0,11	0,12	0,27 (0,15)	0,07 (0,08)	0,08	0,07	0,18(7) (0,1) [18]	2,6	2,87	4,6	7	2; 0,6	
8	0	GaAs	0,33 (0,38)	0,31	0,35	0,33 [38,44]	0,22 (0,25)	0,23	0,21	0,26 [16]	1,35	1,68	3,8	4,8	2,5; 0,5	
9	0	Ga Sb	0,81 (0,93)	0,61	0,68	0,72 (0,72)	0,54 (0,62)	0,45	0,41	0,48 [16]	0,70	1,4	(1,7)	2,6	0,45	
10	0	InP	0,18 (0,21)	0,20	0,22	0,24 (0,24)	0,12 (0,14)	0,15	0,13	0,16 [16]	1,26	1,5	5	7,8	1,6; 0,5	
11	0	In A	0,41 (0,47)	0,40	0,45	0,43 (0,43)	0,27 (0,32)	0,30	0,27	0,29 [16]	0,33	0,76	(3)	4,3	1,4; 1,0; 0,4	
12	0	In Sb	0,89 (1,02)	0,70	0,78	0,84 (0,84)	0,59 (0,68)	0,52	0,47	0,56 [16]	0,18	1,0	(1,5)	(2,2)	2,1; 1,6 0,4	

На основе (3) для изоэлектронных (Si, AlP, например) и квазиизоэлектронных (Si—BAs, Si—GaN, например) рядов нами проведен расчет величин E_0 для соединений группы III—V (E_G , E_L , E_X и E'_G — расстояния между верхней валентной зоной и нижней зоной проводимости в точках Γ , L и X и между верхней валентной зоной и второй зоной проводимости в точке Γ , соответственно); данные для алмаза взяты из работы [46], для серого олова — [6, 37], большинство остальных опытных данных и их интерпретация — наши; значения энергий для гипотетических соединений (C—Si), (Si—Ge) и (Ge—Sn) приняты нами как средние арифметические из энергий компонент (см. табл. 3). Проанализируем табл. 3 снизу вверх. С точностью до 0,1 эв для JnSb решаются значения E_G и E_L совпали с опытными данными; однозначно решается вопрос о природе пиков отражения при 4,13 эв [16, 17] и при 3,2 эв (наши данные и [26]): первый пик отражения соответствует E_X а второй, по-видимому, E_G .

По принятому нами значению E'_G (JnSb) расчет дает E'_G (Sn) \approx 2,6 эв. Неизвестные до сих пор соединения — арсенид таллия и антимонид таллия — должны быть (по оптическим свойствам и энергетической структуре зон) очень похожими на JnSb, особенно TIAs. Хорошее совпадение опытных и расчетных данных обнаружено нами и для GaSb и JnAs; предсказаны величины E'_G . Неизвестное соединение — фосфид таллия — должно быть аналогично GaSb и JnAs; в работе [48] на основе совершенно другого подхода рассчитанное значение E_G (TIP) оказалось равным 0,5 эв: возможно, что TIP ближе по свойствам к JnAs, чем к GaSb. В следующем ряде соединений (Ge—GaAs, AlSb, JnP, TIN) получено даже лучшее согласие между расчетами и опытом; предсказаны значения E'_G для GaAs, AlSb, JnP, TIN и E_X для AlSb; расчет работы [48] дает E_G (TIN) = 1,4 эв, что почти совпадает с нашими данными (см. табл. 3, столбец № 2).

Для всех остальных рассматриваемых соединений группы III—V, за исключением GaP, пока, к сожалению, сопоставление опыта и расчета провести нельзя: известны величины лишь для E_G и то не очень точно. Для фосфида галлия соответствие данных расчета и опыта очень хорошее. В табл. 3 приведены два ряда значений энергий междузонных переходов в соответствии с работой [46] и нашей интерпретацией результатов работы [46] — величины без скобок и в скобках, соответственно. Поэтому для соединений BN, (C—Si), BP, AlN нами получены два ряда расчетных значений величин E_G , E_L , E_X и E'_G . Если учесть, что при выводе формулы (3) приняты значительные упрощения, кажется несколько неожиданным очень хорошее согласие между опытными и расчетными данными, выполняющееся для всех соединений группы III—V.

Хорошее согласие наших расчетов и опыта оправдывает расширение области применения соотношения (3)¹⁰, выведенного в работе [49] только для величин E_G , и подтверждает наше объяснение происхождения пиков отражения кристаллов групп IV и III—V, приведенное в начале работы.

Далее на основе известных обширных данных о структуре зон проводимости из опытов по давлению и явлениям переноса (см. обзоры

¹⁰ Кардона [37] графически сопоставляет величины E_G , E_L и E_X и утверждает, что в одном изоэлектронном ряде наблюдается линейная зависимость между E_0 и λ^2 , т. е. справедлива упрощенная формула Германа ($E_0 = E_{IV} + A\lambda^2$). Однако это явно противоречит опытным данным.

Таблица 3
Опытные и расчетные данные в эв величин E_G , E_L , E_X и E'_G
для кристаллов группы III—V

№ столбца	Кристалл	E_G		E_L		E_X		E'_G	
		опыт	расчет	опыт	расчет	опыт	расчет	опыт	расчет
№ строки	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1	C	5,4 (7)	—	(7) 9	—	12,7 (9,0)	—	7,0 (12,7)	—
2	BN	>5	6,0 (7,6)	—	9,7 (7,6)	—	13,3 (9,7)	—	7,7 (13,3)
3	(C—Si)	~3?	4,5 (5,2)	—	7,3 (5,2)	—	8,6 (6,8)	—	5,3 (8)
4	BP	6	5,1 (5,8)	—	8,0 (5,8)	—	9,2 (7,5)	—	6,0 (8,6)
5	AlN	>4	5,1 (5,8)	—	8,0 (5,8)	—	9,2 (7,5)	—	6,0 (8,6)
6	Si	3,4	—	3,4	—	4,51	—	>3,4	—
7	AlP	~3	4,0	—	4,0	—	5,3	—	>4,0
8	BAs	?	4,0	—	4,0	—	5,3	—	>4,0
9	GaN	3,3	4,0	—	4,0	—	5,3	—	>4,0
10	(Si—Ge)	—	2,1	—	2,9	—	4,5	—	>3,4
11	AlAs	2,2	2,7	—	3,5	—	5,2	—	>4,0
12	Gap	2,6	2,7	3,7	3,5	5,4	5,2	—	>4,0
13	BSb	?	2,7	—	3,5	—	5,2	—	>4,0
14	InN	2,4	2,7	—	3,5	—	5,2	—	>4,0
15	Ge	0,82	—	2,2	—	4,43	—	3,35	—
16	GaAs	1,41	1,33	2,8	2,8	5,10	5,1	—	4,0
17	Alsb	1,6	1,33	2,8	2,8	—	5,1	—	4,0
18	Inp	1,3	1,33	3,1	2,8	5,0	5,1	—	4,0
19	TIN	—	1,3	—	2,8	—	5,1	—	4,0
20	(Ge—Sn)	—	0,45	—	1,7	—	4,0	—	3,0
21	GaSb	0,8	0,9	2,1	2,3	4,3	4,6	—	3,6
22	InAs	0,33	0,9	2,5	2,3	4,6	4,6	—	3,6
23	Tlp	—	0,9	—	2,3	—	4,6	—	3,6
24	Sn	0,08	—	1,28 1,72	—	3,5	—	—	2,6
25	InSb	0,18	0,3	1,68 2,24	1,8 2,3	4,13	4,12	3,2	—
26	TIAs	—	0,3	—	1,8 2,3	—	4,1	—	3,2

В. Пауля и Х. Эренрайха [6]), данных по спектрам отражения при $E > E_g$ и спектрам поглощения при $E \leq E_g$ и теоретических расчетов структуры зон, а также благодаря хорошему согласию наших расчетных данных по (3) с опытом нами проведена первая попытка количественного определения (в эв) расположения экстремумов зон относительно максимума валентной зоны в точке Γ ; в ряде случаев нами предсказаны величины соответствующих междузонных расстояний, отмеченных на рис. 5—8 буквой Р.

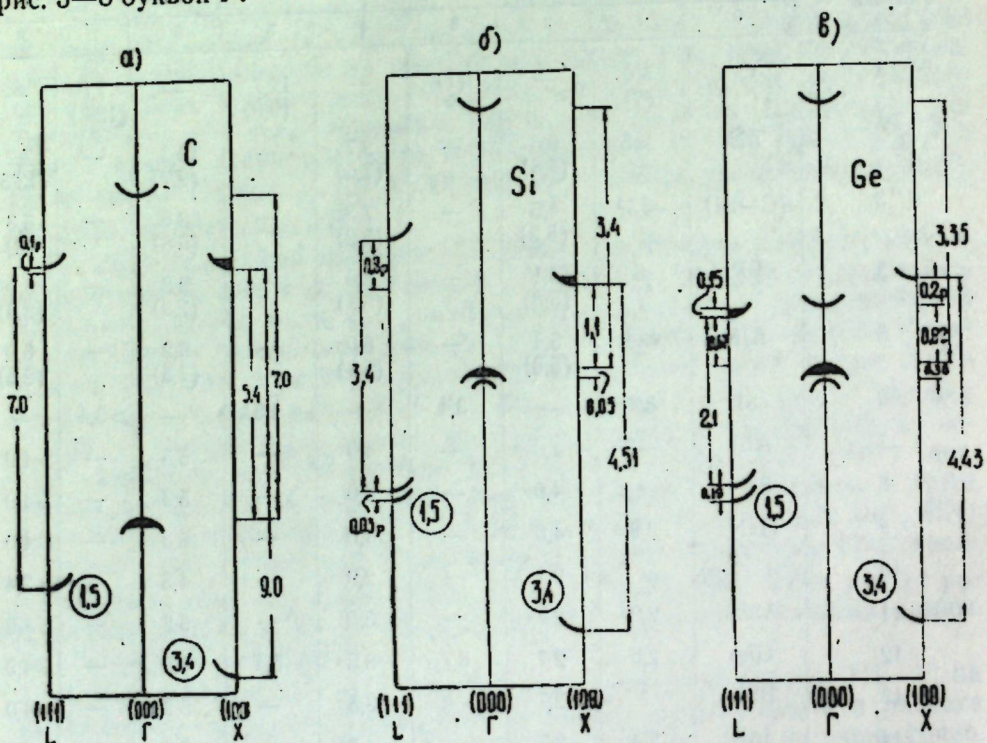


Рис. 5. Схемы расположения зон кристаллов: а) алмаза, б) кремния, в) германия.

Поскольку из опытных данных непосредственно следует, что в валентной зоне расстояния между экстремумами в точках Γ и X равны 3,4; 3,2; 3,3; 3,4 и 3,4 эв для кристаллов Si, GaAs, GaSb, JnP и в точках Γ и L равны 1,5; 1,5 и 1,1 эв, для Ge, Sn, GaSb, соответственно, и теоретически установлена слабая изменчивость этих расстояний у кристаллов одной группы, нам представляется возможным, что энергетические расстояния между экстремумами валентной зоны в точках Γ и X и в точках Γ и L равны 3,4 и 1,5 эв для кристаллов группы IV и 3,4 и 1,0 эв для кристаллов группы III—V (см. цифры в кружках на рис. 5—8). Такое простое предположение позволяет предсказать энергетическое расположение нижней зоны проводимости в точке L для Si, GaP, GaAs, JnP, JnAs и др., в точке X для Ge, Sn, JnAs, JnSb и экстремума верхней валентной зоны AlSb в точке X . На рис. 5—8 приведены также наши расчетные данные о положении второй зоны проводимости в точке Γ всех кристаллов, за исключением Si и Ge (см. рис. 5—8 и табл. 3): вторая зона проводимости кристаллов должна проявиться в виде двух относительно слабых пиков отражения при 2,6 и 3,3 эв (Sn), 4,2 и 4,5 эв (GaP), 4,0 и 4,3 эв (GaAs), 3,6 и 4,3 эв (GaSb), 4,0 и 4,2 эв (JnP), 3,6 и 4,0 эв (JnAs),

3,2 и 4,0 эв (JnSb), 4,0 и 4,75 эв (AlSb); трудность обнаружения этих пиков состоит в том, что для половины рассматриваемых кристаллов они расположены очень близко к интенсивным пикам отражения в точке X . Модель расположения экстремумов валентной зоны кристаллов Si, Ge и Sn распространена нами и на алмаз (рис. 5,а). Для кристалла алмаза энергия непрямых переходов равна 5,4 эв [50], пики отражения расположены при 7,0; 9,0 и 12,7 эв, а минимум зоны проводимости расположен или в точке X или в точке L [6]. Пик отражения у 9,0 эв почти

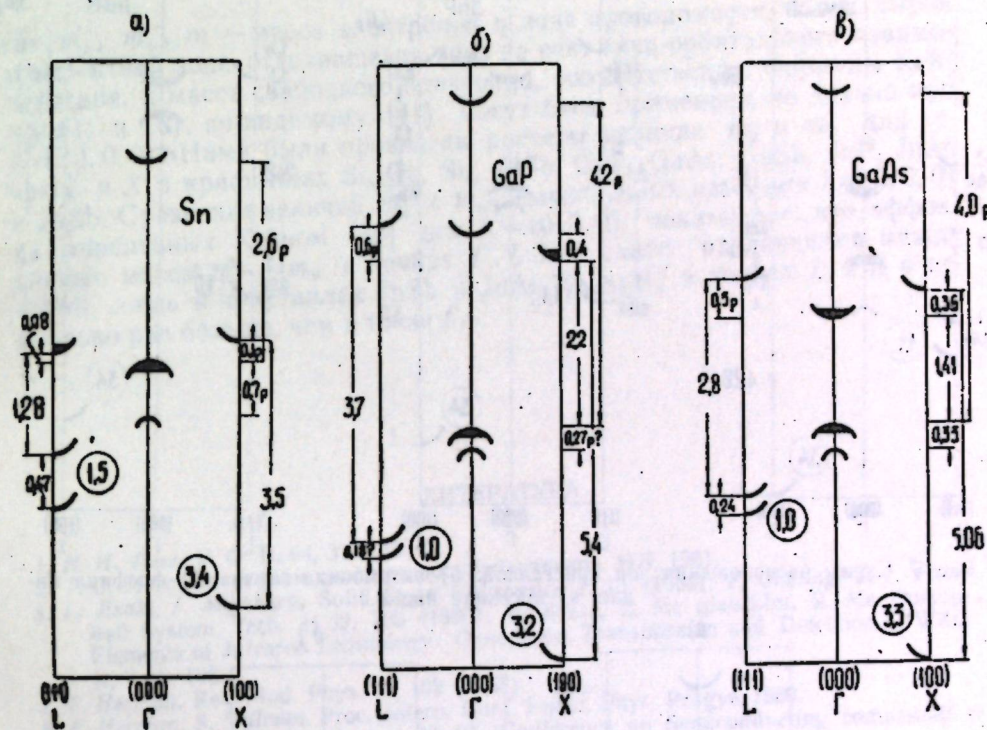


Рис. 6. Схемы расположения зон кристаллов: а) серого олова, б) фосфида галлия, в) арсенида галлия.

точно совпадает по величине с суммой (5,4+3,4) эв, поэтому этот пик отражения соответствует прямым междузонным переходам в точке X . Пик отражения у 7,0 эв, по-видимому, обусловлен наложением переходов в двух областях: в точках L и X ; пик отражения у 12,7 эв, возможно, определяется второй зоной проводимости в точке Γ . Если предложенная схема зон алмаза верна, то в опытах по краю поглощению и явлениям переноса необходимо учитывать близкое расположение экстремумов зоны проводимости в точках L и X .

Из рис. 6 б видно, что величины E_g и E_L близки (4,2 и 3,9 эв, соответственно); поэтому, возможно, два пика отражения кристалла GaP обусловлены наложением переходов в точках L и Γ . На основе принятой нами схемы зон кристаллов (рис. 5—6) можно вычислить длины волн возможных оптических переходов внутри зоны проводимости кристаллов. Для алмаза величины этих переходов оказались равными 12 и 0,8 микрона; данные для остальных кристаллов помещены в табл. 2 (столбец № 13). Для экспериментального обнаружения переходов в зоне проводимости в основном необходимо соблюдение следующих

условий: 1) переходы разрешены по правилам отбора; 2) кристалл достаточно сильно легирован, 3) энергия перехода меньше энергии запрещенной зоны.

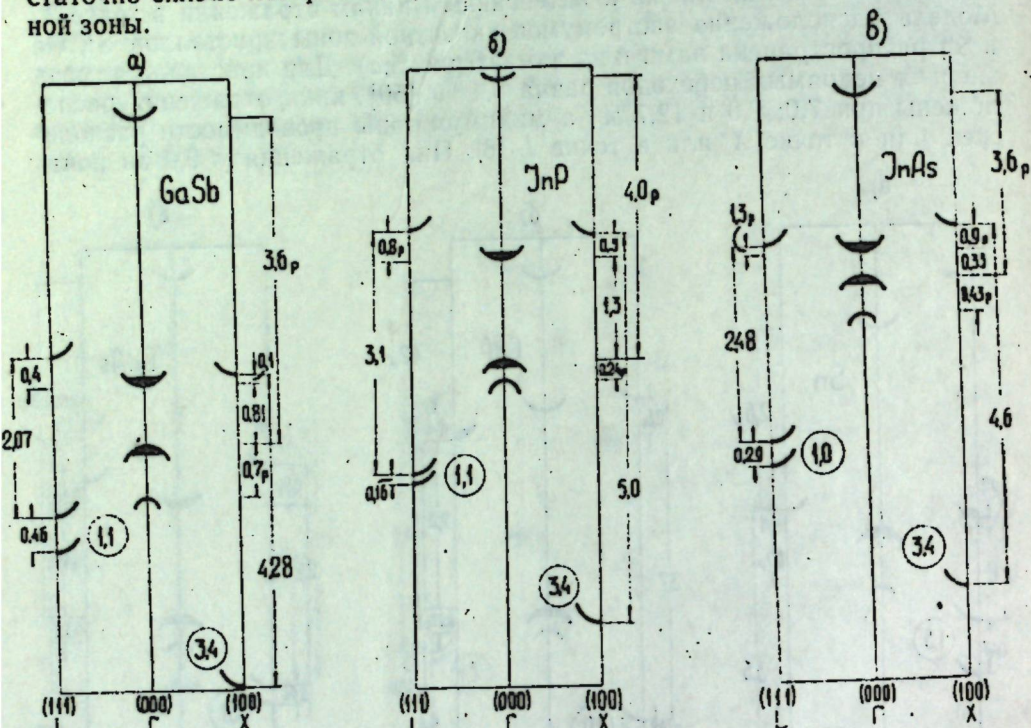


Рис. 7. Схемы расположения зон кристаллов: а) антимида галлия, б) фосфида индия, в) арсенида индия.

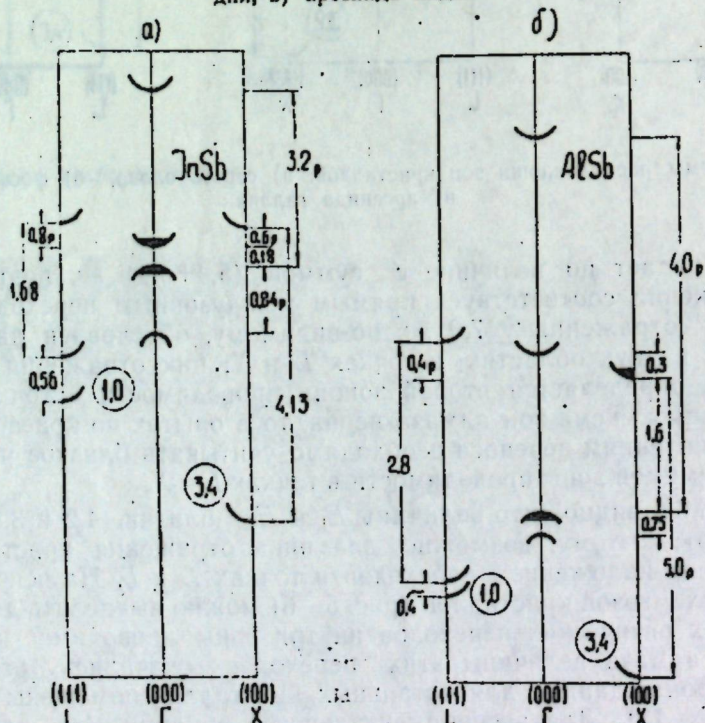


Рис. 8. Схемы расположения зон кристаллов: а) антимида индия, б) антимида алюминия.

Далее кратко остановимся на вопросе о эффективных массах электронов и дырок при $K \neq (0, 0, 0)$. Кейн [39] вывел следующие соотношения для кристаллов III-V в точке $K = (0, 0, 0)$:

$$\frac{m}{m_c} = 1 + \frac{40}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta_{co}(\Gamma)} \right), \quad (4)$$

$$\frac{m}{m_v} = 1 - \frac{40}{3} \times \frac{1}{E_g + \Delta_{co}(\Gamma)}, \quad (5)$$

где m_c , m_v , m — масса электронов в зоне проводимости, масса дырок в валентной зоне, отделившейся вниз за счет спин-орбитального взаимодействия, и масса свободного электрона, соответственно. Формулы Кейна (4) и (5), по-видимому [41], могут быть применены не только при $K = (0, 0, 0)$. Нами были проведены расчеты величин m_c и m_v для точек L и X в кристаллах Si, Ge, Sn, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, JnP, JnAs и JnSb. Сравнение величин m_c и m_v , вычисленных нами для $K \neq (0, 0, 0)$ и вычисленных Кейном [38] для $K = (0, 0, 0)$, показывает, что эффективные массы m_c и m_v в точках Γ , L и X слабо различаются между собой; лишь в кристаллах JnSb и JnAs m_c и m_v в точках L и X в несколько раз больше, чем в точке Γ .

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. И. Фань, У. Ф. Н, 64, 315 (1958).
2. Т. С. Моос, Оптические свойства полупроводников, ИЛ, 1961.
3. L. Esaki, J. Miyahara, Solid State Electronics 1, 13 (1960). T. Geyling, J. J. Forst, Bell System Tech. J, 39, 705 (1960). P. Kruse, L. Mc glauchlin, R. Mc Quistan, Elements of Infrared Technology: Generation, Transmission and Detection (J. Wiley, N. York, 1961).
4. F. Herman, Rev. Mod. Phys. 30, 102 (1958).
5. F. Herman, S. Skilman, Proc. Intern. Conf. Semic. Phys, Prague, 1960.
6. J. Appl. Phys. 1961, Suppl. t. v. 32, 10 (Conference on Semiconducting compounds at Schenectady).
7. В. В. Соболев, Автореферат-канд. дисс., Л., 1962.
8. Е. Ф. Гросс, В. В. Соболев. Тезисы XIII совещания по спектроскопии (Ленинград, июль 1960), изд. АН СССР.
9. Е. Ф. Гросс, В. В. Соболев. Тезисы II Всесоюзного совещания по фотоэлектрическим и оптическим явлениям в полупроводниках (Львов, октябрь 1961), изд. Львовского госуниверситета.
10. В. В. Соболев. Тезисы XV совещания по спектроскопии (Минск, июль 1963), изд. АН БССР.
11. В. В. Соболев. Тезисы III Всесоюзного совещания по фотоэлектрическим явлениям в полупроводниках (Киев, октябрь-ноябрь 1963), изд. Киевского госуниверситета.
12. В. В. Соболев, ДАН СССР, 151; 1308 (1963), 152, 1342 (1963).
13. J. C. Phillips, J. Phys. chem. Solids 12, 208 (1960).
14. H. R. Philipp, E. A. Taft, Phys. Rev. 113, 1003 (1959); 120, 37 (1960).
15. L. Kleinman; J. C. Phillips, Phys. Rev. 118, 1153 (1962).
16. J. Tauc, E. Antonchik, Phys. Rev. Lett, 5, 253 (1960).
17. J. Tauc, A. Abraham, J. Phys. chem. Solids, 20, 190 (1961).
18. M. Cardona, J. Appl. Phys. Suppl. t. v. 32, 2151 (1961).
19. В. С. Вавилов, А. А. Гунниус, М. М. Гориков, ЖТФ, 28, 254 (1958). В. С. Вавилов, К. И. Брицын, ЖЭТФ, 34, 551 (1958).
20. J. C. Phillips, Phys. Rev., 125, 1931 (1962).
21. H. Ehrenreich, H. R. Philipp, J. C. Phillips, Phys. Rev. Lett, 8, 59 (1962).
22. J. C. Phillips, D. Brust, F. Bassani, Report Intern. Conf. Phys. Semicond. Exeter, 1962.
23. F. Bassani, M. Joshimine, Phys. Rev. 130, 20 (1963).
24. E. Loh, J. C. Phillips, J. Phys. Chem. Solids, 24, 493 (1963).

25. L. Liu Phys. Rev. 126, 1317 (1962).
26. Н. И. Курдюмов, ФТТ, 5, 1797 (1963).
27. К. Хильсум, А. Роуз-инс. Полупроводники типа 3-5, ИИЛ, М., 1963.
28. Н. А. Горюнова. Химия алмазоподобных полупроводников. Изд-во Ленинградского государственного университета, 1963.
29. Сборник статей. Полупроводниковые вещества (Вопросы химической связи) под ред. В. П. Жузе, изд-во ИЛ, М., 1960, стр. 134—202.
30. К. Б. Толыго, УФН, 74, 269 (1961); ФТТ, 2, 2655 (1960).
31. Э. Н. Король, К. Б. Толыго, ФТТ, 5, 2193 (1963).
32. S. Zwerdling, K. J. Button, B. Lax, L. M. Roth, Phys. Rev. Lett, 4, 173 (1960).
33. A. H. Kahn, Phys. Rev. 97, 1647 (1955).
34. Ф. М. Гашиш-заде, В. Е. Харцеев, ФТТ, 1453 (1961).
35. G. G. Macfarlane, T. P. Mc Lean, J. E. Quarrington, V. Roberts, Phys. Rev. 108, 1377 (1957); Proc. Phys. Soc. 71, 863 (1958).
36. H. Ehrenreich, J. Appl. Phys. Suppl. t. v. 32, 10, 2155 (1961).
37. M. Cardona, D. L. Greenaway, Phys. Rev. 125, 1291 (1962).
38. R. Braunstein, E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids, 23, 1423 (1962).
39. E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids, 1, 245 (1957).
40. В. В. Соболев, ЖОС, 16, 1 (1964).
41. B. Lax, Report Intern. Conf. Phys. Semicond., Exeter, 1962.
42. M. V. Hobden, J. Phys. Chem. Solids, 23, 821 (1962).
43. W. G. Spitzer, H. J. Fan, Phys. Rev., 108, 268 (1957).
44. W. G. Spitzer, J. M. Whelan, Phys. Rev. 114, 59 (1959).
45. R. E. Blunt, H. P. R. Frederikse, J. H. Becker, W. R. Hosler, Phys. Rev. 96, 578 (1954); W. J. Turner, W. E. Reese, Phys. Rev. 117, 1003 (1960).
46. H. R. Philipp, E. A. Taft, Phys. Rev. 127, 159 (1962).
47. F. Herman, J. Electronics, 1, 103 (1956).
48. Б. Ф. Ормонт. Вопросы металлургии и физики полупроводников. (Труды 4 совещания по полупроводниковым материалам), изд. АН СССР, 1961, стр. 5.
49. M. Cardona, Phys. Rev. 129, 69 (1963).
50. C. D. Clark, J. Phys. Chem. Solids, 8, 481 (1958).

В. В. СОБОЛЕВ

СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН ЫН СЕМИКОНДУКТОРИИ ДИН ГРУПЕЛЕ IV ШИ III—V

Резюме

С'ау ефектуат обсервэрь асупра структурей компликате а спектрелор де рефлексие ын интервалул 1—6 еV ла $T=290^{\circ}\text{K}$ пентру ун шир де кристале дин групеле IV ши III—V. Се пропуне о експликацие а структурий ачестор спектре пе база скемей транзицилор интерзониче директе ын пунктеле L, X ши Г.

Се калкулязэ мэрия дезагрегэрий спин-орбитале а зонелор де валенцэ ын пунктеле Г ши L, транзицилор Г, L ши X. Се пропуне схема дистрибуций екстремелор зонелор ын пунктеле L, X ши Г.

М. И. ШМИГЛЮК

К ВЫВОДУ ГАМИЛЬТониАНА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ДИПОЛЬНО-АКТИВНЫХ ЭКСИТОНОВ

1. В работе А. Г. Самойловича и С. Л. Королюка [1] при помощи несколько видоизмененного метода В. Л. Бонч-Бруевича [2] выведен гамильтониан элементарных возбуждений (электронов, дырок и экситонов) с учетом взаимодействия между ними. Рассматривался случай, когда ближайшее возбужденное состояние атомного узла не вырождено.

Ясно, однако, что при изучении коллективных свойств дипольно-активных экситонов необходимо знание гамильтониана этих экситонов именно с учетом их вырождения. Если пренебречь эффектом кулоновского дальнего действия, то в кубических кристаллах экситоны 3-кратно вырождены.

Для этого случая и обобщается в данном сообщении гамильтониан взаимодействующих параэкситонов.

2. Как и в работе [1], мы будем рассматривать простейшую модель атомного полупроводника, каждый атом которого имеет насыщенную валентную оболочку с двумя s-электронами. Ближайшее возбужденное p-состояние атома 3-кратно вырождено. Остальными возбужденными состояниями пренебрегаем. В приближении слабовозбужденного кристалла, следуя работе [1], получаем следующий гамильтониан параэкситонов

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_q \sum_{\sigma} \left\{ \varepsilon_1(q|\sigma) \gamma_{q\sigma}^+ \gamma_{q\sigma} + \sum_{p+q} \varepsilon_2(qp|\sigma) \gamma_{q\sigma}^+ \gamma_{p\sigma} \right\} + \\
 & + \sum_q \sum_{\substack{\sigma, \sigma_1 \\ (\sigma \neq \sigma_1)}} \left\{ \varepsilon_3(q|\sigma, \sigma_1) \gamma_{q\sigma}^+ \gamma_{q\sigma_1} + \sum_{p+q} \varepsilon_4(qp|\sigma, \sigma_1) \gamma_{q\sigma}^+ \gamma_{p\sigma_1} \right\} + \\
 & + \sum_{\substack{q, p \\ (p+q)}} \left\{ \sum_{\sigma, \sigma_1} \varepsilon_5(qp) \gamma_{q\sigma}^+ \gamma_{q\sigma_1} \gamma_{p\sigma}^+ \gamma_{p\sigma_1} + \right. \\
 & + \sum_{\sigma, \sigma_1, \sigma_2} \varepsilon_6(qp|\sigma, \sigma_1) \gamma_{q\sigma}^+ \gamma_{q\sigma_1} \gamma_{p\sigma_2}^+ \gamma_{p\sigma_2} + \\
 & \left. + \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} \varepsilon_7(qp|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \gamma_{q\sigma_1}^+ \gamma_{q\sigma_2} \gamma_{p\sigma_3}^+ \gamma_{p\sigma_4} \right\}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где $\gamma_{q\sigma}^+$ и $\gamma_{q\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения параэкситона на узле q в состоянии σ ,

$$\varepsilon_1(q|\sigma) = A_{q\sigma}^{q\sigma} - A_{q\sigma}^{q\pi} + B_{q\sigma}^{q\sigma} + B_{q\sigma}^{q\pi} + \sum_{p+q} B_{q\sigma}^{p\pi} - \sum_{p+q} B_{q\sigma}^{p\sigma}$$

$$\begin{aligned}
 - 2 \sum_{\sigma+q} B_{q\sigma}^{q\pi} + 2 \sum_{p+q} B_{q\sigma}^{p\pi} \varepsilon_2(qp|\sigma) &= 2 B_{q\sigma}^{q\sigma} - B_{q\sigma}^{q\pi} \varepsilon_3(q|\sigma, \sigma_1) = \\
 = A_{q\sigma}^{q\sigma} + B_{q\sigma}^{q\pi} + B_{q\sigma}^{q\sigma} - \sum_{\sigma+q} B_{q\sigma}^{p\pi} + 2 \sum_{p+q} B_{q\sigma}^{p\pi} \varepsilon_4(qp|\sigma, \sigma_1) &= \\
 = 2 B_{q\sigma}^{q\sigma} - B_{q\sigma}^{q\pi} \varepsilon_6(qp) = \frac{1}{2} B_{q\sigma}^{q\pi} - \frac{1}{4} B_{q\sigma}^{p\pi} \varepsilon_6(qp|\sigma, \sigma_1) &= \\
 = -B_{q\sigma}^{q\pi} + \frac{1}{2} B_{q\sigma}^{p\pi} \varepsilon_7(qp|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = \frac{1}{2} B_{q\sigma}^{q\sigma} - \frac{1}{4} B_{q\sigma}^{p\sigma} \varepsilon_7 & \quad (2)
 \end{aligned}$$

В (2) π — основное состояние атомного узла, $\sigma = 1, 2, 3$ — возбужденное состояние узла. Коэффициенты $A_{q\lambda}^{q\lambda'}$ и $B_{q\lambda, q\lambda'}^{q\lambda, q\lambda'}$ выражаются через одночастичные волновые функции электронов

$$\begin{aligned}
 A_{q\lambda}^{q\lambda'} &= \int \psi_{q\lambda}^+(r) H(r) \psi_{q\lambda'}(r) dr, \\
 B_{q\lambda, q\lambda'}^{q\lambda, q\lambda'} &= \iint \psi_{q\lambda_1}^+(r) \psi_{q\lambda_2}^+(r') G(|r-r'|) \psi_{q\lambda_1}(r) \psi_{q\lambda_2}(r') dr dr',
 \end{aligned}$$

где $\lambda = \pi, \sigma$; $H(r)$ — гамильтониан электрона в периодическом поле всех ионов решетки, $G(|r-r'|)$ — потенциальная энергия взаимодействия двух электронов. В кубических кристаллах, для которых полученный гамильтониан актуален, коэффициент $\varepsilon_3(q|\sigma, \sigma_1) = 0$.

3. Используя обычное преобразование Фурье для $\gamma_{q\sigma}^+$ и $\gamma_{q\sigma}$, переводим гамильтониан (1) в пространстве квазиимпульсов

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_K \sum_{\sigma} \{ [\varepsilon_1(\sigma) + \varepsilon_2(k|\sigma)] \gamma_{k\sigma}^+ \gamma_{k\sigma} + \\
 & + \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \varepsilon_3(k|\sigma, \sigma_1) \gamma_{k\sigma}^+ \gamma_{k\sigma_1} \} + \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4, \sigma_1, \sigma_2} \varepsilon_4(k_1 - k_2) \cdot \\
 & \cdot \gamma_{k_1, \sigma_1}^+ \gamma_{k_2, \sigma_2} \gamma_{k_3, \sigma_1}^+ \gamma_{k_4, \sigma_2} + \sum_{\sigma_3} \varepsilon_5(k_1 - k_2 | \sigma_1, \sigma_2) \cdot \\
 & \cdot \gamma_{k_1, \sigma_1}^+ \gamma_{k_2, \sigma_2} \gamma_{k_3, \sigma_3}^+ \gamma_{k_4, \sigma_3} + \sum_{\sigma_3, \sigma_4} \varepsilon_6(k_1 - k_2 | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \cdot \\
 & \cdot \gamma_{k_1, \sigma_1}^+ \gamma_{k_2, \sigma_2} \gamma_{k_3, \sigma_3}^+ \gamma_{k_4, \sigma_4} \} \cdot \delta(k_1 - k_2 + k_3 - k_4). \quad (3)
 \end{aligned}$$

где $\gamma_{k\sigma}^+$ и $\gamma_{k\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения параэкситона с квазиимпульсом k в поляризации σ . В приближении свободных экситонов коэффициент $\varepsilon_1(\sigma)$ определяет энергию возбуждения параэкситона с поляризацией σ , а $\varepsilon_2(k|\sigma)$ определяет его эффективную массу.

Третий член в (3) показывает, что в кубическом кристалле нет точного разделения параэкситонов на поперечные и продольные. При $k \rightarrow 0$, $\varepsilon_4(k|\sigma, \sigma_1) = 0$, то есть в случае предельно длинных волн эффект перемешивания экситонов различной поляризации исчезает.

В дальнейшем с помощью гамильтониана (3) совместно с гамильтонианом свободного фотонного поля и гамильтонианом взаимодействия параэкситонов со светом будут рассмотрены различные нелинейные оптические эффекты в кубических кристаллах. В заключение автор выражает глубокую благодарность С. А. Москаленко за ценные советы, а также С. Л. Королюку за ознакомление с подробностями его расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Г. Самойлович и С. Л. Королюк, ФТТ, 1, вып. 10, 1592 (1959).
 2. В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ, 25, 417 (1953).

М. И. ШМИГЛЮК

КУ ПРИВИРЕ ЛА ДЕДУЧЕРЯ ХАМИЛТОНИАНУЛУИ
 ЕКСЧИТОНИЛОР ДИПОЛ АКТИВЬ, ҚАРЕ ИНТЕРАКЦИОНЯЗЭ

Резумат

Се дедуче хамилтонианул параексцитонилор триплу деженераць, лубнду-се ын консидерацие интеракциуня лор.

СОДЕРЖАНИЕ

А. И. Бобрышева. О взаимодействии экситонов в деформируемой решетке	3
Ю. С. Боярская, Р. П. Житару. О полярности механических свойств на грани (111) монокристаллов NaCl	8
Д. В. Гицу. О структуре диаграмм вращения гальваномагнитных эффектов вокруг осей C_4 и C_2 в кристаллах D_{4h} и D_{2h}	15
И. И. Жеру. Сверхтонкое взаимодействие в возбужденном состоянии F-центра	20
К. С. Кабисов, Э. П. Синяевский. К теории возмущений для электронной волновой функции в задаче о безызлучательных переходах	27
А. И. Касиян, Л. З. Кон. Некоторые вопросы адиабатической теории возмущений II	34
В. А. Коварский, Е. В. Витуу. К теории генерационно-рекомбинационных флуктуаций в полупроводниках	44
В. А. Коварский, И. А. Чайковский. Кинетические уравнения для процессов рекомбинации в квантующем магнитном поле	51
В. Н. Ланге, Т. И. Ланге, С. Д. Шутов. Анизотропия микротвердости Sb_2Se_3	61
С. А. Москаленко, А. В. Леляков. Кинетические уравнения для вырожденных экситонов, взаимодействующих с фононами при постоянной подсветке	69
В. В. Соболев. Энергетическая структура зон кристаллов групп IV и III—V	74
М. И. Шмиглюк. К выводу гамильтониана взаимодействующих дипольно-активных экситонов	92

Академия наук Молдавской ССР

ИЗВЕСТИЯ
№ 12

Редактор Т. Плинка.
Художественный редактор Л. Кирияк.
Технический редактор Л. Белоусова.
Корректор И. Андрейчук.

Сдано в набор 30/IX 1964 г. Подписано к печати 5/1 1965 г.
Формат бумаги 70×108¹/₁₆. Печатных листов 8,40. Уч.-изд.
листов 5,78. Тираж 500. АБ00002. Цена 45 коп. Зак. № 2146.

Издательство «Карта Молдовеныскэ»
Кишинев, ул. Жуковского, 44.

Полиграфкомбинат, Кишинев, Госпитальная, 32.

АВТОРСКАЯ ПОПРАВКА

Стр.	Строка	Напечатано	Следует читать
59	10 сверху	$F_1(\omega) = \sum_{\alpha, s} \frac{X_{\alpha\alpha} W_{\alpha\alpha}}{\omega^2 + W_{\alpha\alpha} + W_{ss}}$	$F_1(\omega) = \sum_{\alpha, s} \frac{X_{\alpha\alpha} W_{\alpha\alpha}}{\omega^2 + (W_{\alpha\alpha} + W_{ss})}$

Известия № 12, 1964 г.