## МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ УССР КИЕВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А. М. ГОРЬКОГО

В. А. ДУБЧАК

# ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ РАЗВИТИЯ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ

История науки и техники, 580

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

#### МИЧИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ УССР КИЕВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А. М. ГОРЬКОГО

В. А ДУБЧАК

На правах рукописи

# ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ РАЗВИТИЯ ЗОННОЙ ТЕОРИН ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЫ МЕТАЛЛОВ И ПОЛУПРОВОДНИКОВ

История науки и техники, 580

Автореферат

диссертации на соискание ученей стелени кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Киевском государственном педагогическом институте имени А. М. Горького.

Научный руководитель — кандидат физико-математических наук, и. о. профессора В. М. Коновалов.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор **Б. И. Спасский,** доктор физико-математических наук, профессор **Л. С. Полак**,

Бнешния рецензия Львовского государственного университета имени И. Я. Франко.

Автореферат разослан « 🥍 »

1968 г.

Защита диссертации состоится «

1968 г. на засе-

данни Ученого Совета физико-математического факультета Кневского государственного педагогического института имени А. М. Горького, Киев, Бульвар Шевченко, 22,24, ауд. 231.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке институга.

Ученый секретарь Совета

н, шкиль.

Выдающийся руководитель и организатор советской физики С. И. Вавилов еще в 1933 г. привел убедительные доводы, разъясияющие, почему история науки сама должна стать наукой. Залог этого С. Н. Вавилов усматривал в экспоненциальном характере развития естествознания и техники и в том факте, что история науки -- необходимая и достаточная предпосылка планирования науки. С. И. Вавилов подчеркиул также, что для превращения истории науки в «истиниую единствениую теорию познания» ее главиую задачу должно составить исследование кинетики развития науки. Это переыликается с представлениями Л. Эйнштейна, считавшего, чтс челью историко-научной работы должно быть выявление инвариантных идей, пронизывающих всю эволюцию пауки. также с высказываниями Л. де Бройля и др. о пользе и уроках истории наук, особенно, в деле раскрытия механизма научного прогресса.

Историко-научные исследования неоднократно оказывали стимулирующее действие на развитие физики— (достаточно испомнить, например, значение историко-логического исследования оснований статистики Т. и П. Эренфестами для развития теории необратимых процессов). Ценность таких исследований особенно возрастает сейчас, когда физическое представление о мире составляет, по-видимому, главную часть истинной культуры нашей эпохи. Не удивительно, что в последнее время все большее внимание привлекает история физики XX столетия.

Одной из актуальных проблем истории физики XX столетия является исследование развития атомной теории твердых тел, что способствовало бы воссозданию объективной картины становления физики металлов и полупроводников и пролило бы свет на закономерности эволюции гипотезы квантов в проблематике твердого тела. Такую задачу всестороннего освещения истории физики твердого тела и вклада отечественных ученых в эту область знаний в нашей литерату-

ре выдвинул А. М. Павленко (1949 г.), но преждевременная кончина помешала ему осуществить эту программу. После содержательной статьи Г. Пирсона и В. Браттейна (1955 г.), которые описали историю полупроводниковых исследований, приведших к изобретению транзистора, уже в 60-е г.г. появилось несколько работ, посвященных истории исследований отдельных свойств металлов и полупроводников (У. И. Франкфурт. Е. Н. Димарова), эволюции классической электронной теории металлов (В. М. Дуков, К. Видеркер), а также предистории физики твердого тела (К. Смит). Однако часть информации по истории физики твердого тела все еще не систематизирована, будучи «растворенной» в журнальной и монографической литературе по металлам полупроводникам, и никто, по-видимому, не пытался еще воссоздать на основе этих данных объективную картину развития атомной теории твердых тел квантового периода.

Все это обусловило необходимость настоящей работы, цель которой — проследить кинетику становления зонной теории электропроводности металлов и полупроводников в ее связи с основными этапами развития атомной теории твердых тел в целом. Реферируемая работа состоит из введения, четырех глав, заключения (278 стр. текста) и списка цитированной литературы (479 наименований).

В первой главе кратко рассматривается классический период развития теории твердых тел. Здесь прослеживается зарождение систематических представлений о твердом теле в рамках минералогии и учения о прочности, их последующее развитие в математические теории упругости и симметрии кристаллов, формирование физического подхода к проблеме твердого тела и его максимальное развитие в классический период в рамках электронной теории металлов Друде-Лоренца и атомно-электрической теории решеток М. Борна.

Как явствует из проведенного рассмотрения [2] (1958 г.), классический период теории твердых тел прошел под знаком поисков основы для единой интерпретации их свойств. Ее не смогла дать кристаллография, в которой факт решетчатого строения кристаллов был завуалирован громоздкостью аналитического рассмотрения последних, а также теория упругости, развивавшаяся на базе иден сплошности. Такая основа была обнаружена лишь в рамках физического подхода к проблеме твердого тела, который, начиная с работ М. В. Ломо-

(ОЗНАКОМИТЕЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ) носова и Р. Босковича, постепенно пробивал себе дорогу в

попытках объяснения отдельных свойств твердых тел с помощью атомистической гипотезы (Л. Зеебер, В. Вебер, В. Томсон, П. Друде-Г. Лоренц, Г. Ми-Е. Грюнайзен, А. штейн, П. Дебай и др.); она стала очевидной после установления М. Лауэ, В. Фридрихом и П. Книппингом строения решетки кристаллов (1912 г.). С этого момента начинается фактическое развитие атомной теории твердых тел, поэтому период до 1912 г. следует считать ее предисторией. Важной особенностью этого этапа явился тот факт, что он вплотную подвел к необходимости учета неклассического. квантового характера движения атомов и электронов в твердых телах благодаря обнаружению трудностей с костью и электропроводностью металлов, трудностей, связанных с теоремой Нериста и вопросом о природе сил сцепления в кристаллах. К сходным выводам пришел позже К. С. Смит (1965 г.) при специальном рассмотрении предистории физики твердого тела.

Вторая глава посвящена исследованию процесса формирования основ квантовой статистики. Ее рассмотрение продиктовано необходимостью выяснения особенностей становления начального квантового периода в физическом подходе к изучению свойств твердых тел. Поэтому изложению развития квантовой статистики предпослано также исследование состояния теории металлов в период 1905—1924 г.г.

Рассмотрение характера трудностей теории металлов этого периода и предпринимавшихся попыток их устранения показывает, что:

трудности классической теории металлов оказались связанными с несовершенством моделей металла и методов рассмотрения электронного газа;

для устранения этих трудностей еще до работ Паули— Зоммерфельда (1927—1928 г.г.) делались попытки ввести в теорию металлов идею квантов;

в связи с изучением металлов наметились некоторые подходы, оказавшиеся впоследствии характерными для полупроводников;

на протяжении 1905—1924 г.г. было высказано ряд соображений о путях дальнейшего развития теории металлов (идея о необходимости учета периодичности поля решетки, мысль о неприменимости к электронному газу классичес-

кой статистики и объяснении температурной зависимости электропроводности температурной зависимостью длины свободного пробега электрона).

Таким образом (вопреки мнению А. Впльсона, что развитие теории металлов после 1905 г. приостановилось вплоть до 1927 г.) на протяжении 1905—1921 г.г. была выполнена большая работа по анализу трудностей электронной теории, подготовившая качественный скачок в понимании механизма электропроводности твердых тел на основе волновой механики.

Рассмотрение развития квантовой статистики [3, 4] (1959-1960 г.г.) показывает, что формирование ее основ (после работ М. Планка 1900 г.) происходило по двум отдельным направлениям. Одним из них явилось направление разработки квантовостатистической теории излучения (А. Эйнштейи, П. Эренфест, П. Дебай, А. Ф. Иоффе, Ю. А. Крутков, А. Комнтон, В. Паули, 1905—1923 г.г.), другим — направление пересмотра кинетической теории материи и классической статистики идеальных газов на базе гипотезы Планка и теоремы Нериста (А. Эйнштейн, П. Дебай, О. Саккур, Х. Тетроде, М. Планк, П. Эренфест, Э. Шредингер, 1907—1925 г.г.). В то время, как первое из этих направлении привело к обнаружению недостаточности классической статистики для трактовки излучения и к установлению корпускулярно - волнового дуализма его свойств, не менее важным оказалось и второе, нбо в его рамках выкристаллизовался решающий для возникновения квантовой статистики принции перазличимости тождественных микрочастиц и наметился кваитовостатистический подход к проблеме твердого тела. Синтез результатов обонх этих направлений, вызванный потребностью дать непротиворечивое обоснование формулы Планка (без использования классической электродинамики), привел к методу С. И. Бозе (1924 г.). Метод Бозе в руках А. Эйнштейна дал статистику вырожденного бозе-газа и корпускулярно-волновой дуализм частиц материи (1924—1925 г.г.). Вместе с гипотезой Д. де Бройля это предопределило шредингеровский подход к меманике атома (1926 г.), независимый от полхода Бора Гейзенберга, базировавшегося на спектроскоппи атомов. Наконец, сочетание «спектроскопического» принципа Паули с методом Бозе—Эйнытейна дало статистику частиц с полуцелым спином (Э. Ферми, П. Дирак, В. Паули,

1927 г.г.) и ее плодотворные применения к вырожденному электронному газу в сложных атомах (Л. Томас, Э. Ферми, 1927 г.) и металлах (В. Паули, А. Зоммерфельд, 1927—1928 г.г.).

Таким образом исторически наиболее полное развитие получил вначале статистический аспект квантовой гипотезы. Учет этого обстоятельства и характера трудностей проблемы кристалла как многочастичной задачи объясняет, почему квантовая теория твердых тел начала формироваться как квантовостатистическая теория (теория теплоемкости кристаллов, теория электронного газа в металлах Паули—Зоммерфельда). К выводу о важности статистического аспекта квантовой гипотезы в начальный период ее развития пришел также М. Д. Клейн (1964 г.).

Центральное место в реферируемой работе третьей главе, в которой исследуется процесс формирования зонной теории электропроводности твердых тел. Особое виимание в этой главе уделяется предистории волновомеханической теории электропроводности металлов, логике синтеза одноэлектроиного приближения и кинетического метода столкновений Блоха, специфике формирования основных представлений зонной теории (картины разрешенных и запрещенных зон, зон Бриллюэна, понятий дырки и эффективной массы посителей тока), закономерностям перерастания теории электропроводности металлов в единую зонную теорию электропроводности твердых тел. В связи с последним пунктом рассматривается история исследований (отечественных и зарубежных), приведших к возпикновению физики полупроводников, и совершенствование блоховской одноэлектронной теории на базе аднабатического приближения и метода самосогласованного поля. Исторический генезис зонной теории представляет значительный интерес, поскольку явилась первым квантовомеханическим обобщением ной теории твердых тел, охватившим с единой точки зрения большинство свойств идеальных кристаллов, и составила базу для дальнейшего развития этой теории. В то же время история зонной теории до сих пор специально не рассматривалась, а встречающиеся в монографиях и обзорных экскурсы по этому вопросу обычно неполны и, часто, неточ ны

Наше рассмотрение lbl показывает, что из всех проблем этапа элементарной квантовой теорин твердых тел (1912—1928 г.г.) наибольшую роль в процессе подготовки основ зонной теории сыграла электронная теория металлов, устранение трудностей которой привело к формулировке одноэлектронного приближения. Первый кардинальный успех на этом пути был достигнут Я. И. Френкелем (1924 г.). Стремление устранить трудности друде-лоренцевской модели металла привело Френкеля к попытке вскрыть истинный характер движения электронов в кристаллах еще до создания квантовой механики. С помощью имевшихся скудных средств (боровской динамики атома и теоремы вириала) Френкель качественно решил эту задачу, придя к идее коллективизации валентных электронов в металлах, и это явилось предвосхищением квантовомеханической теории твердых тел.

Таким образом идея кваитов была впервые введена в теорию электропроводности металлов Я. И. Френкелем (1924 г.), а не вошла в нее через квантовую статистику в работах Паули—Зоммерфельда (1927—1928 г.г.), как считают А. Вильсон и Р. Смит. В проблеме электропроводности металлов центральным оказался вопрос обоснования модели металла Друде и уточнения статистического метода рассмотрения электронного газа Лоренца. И если Зоммерфельд добился успеха в решении второй задачи в рамках сложившегося направления квантовостатистической теории твердых тел, заслуга наметок нового «кинематического» подхода к проблеме кристаллов принадлежит Френкелю.

Оба эти аспекта соединил Ф. Блох (1928 г.), работой которого началось фактическое развитие зонной теории твердых тел. Учет в «кинематическом» подходе Френкеля периодичности поля решетки привел Блоха к формулировке одноэлектронного приближения в теории кристаллов. Использование же статистической схемы Зоммерфельда (при учете квантовой динамики электронов и самой решетки) дало кинетический метод столкновений Блоха.

Примечательно, что к рассмотрению одноэлектронного уравнения Шредингера с периодическим потенциалом в разной связи почти одновременно пришли многие авторы. При этом, вопреки мпению  $\Phi$ . Зейтца, не только M. Д. Стрэтт, но и Я. И. Френкель (1927 г.) качественно предвосхитил зонную структуру электронного энергетического спектра, обнаружив

условие Вульфа—Бреггов для отражения электронных воли от илоских сеток кристалла. Однако лишь Блох физически артументировал необходимость рассмотрения одноэлектронного уравнения Шредингера для кристалла со «словесно перенормированным» потенциалом. Решающую роль в генезисе блоховского одноэлектронного подхода к проблеме кристалла сыграла идея туннельного эффекта Л. И. Мандельштама— М. А. Леонтовича— Г. Гамова в форме, примененной к молекулам Ф. Хундом, и это лучше всего подчеркивает органичественност в примененной к молекулам Ф. Хундом, и это лучше всего подчеркивает органичественност в примененност в примененност

кую связь зонной теории с волновой механикой.

Хотя с помощью приближения сильной связи Блох фактически получил разрешенную S — полосу эпергии электрона в решегке, он не осознал еще зонной структуры электронного энергетического спектра в целом. Вначале большее винмание привлекла задача создания квантовой теории явлений переноса в металлах. Понадобились работы Р. Пайерлса и П. М. Морса (1929—1930 г.г.) по развитню приближения связи прежде, чем. Л. Бриллюэн, Р. Крониг—В. Пении А. Вильсон (1930—1931 г.г.) придали вопросу о зонной структуре электронного энергетического спектра кристаллов самостоятельное значение. В связи с развитием кинетики металлов возникали также основные понятия зонной теории — понятие электронной дырки (при рассмотрении Холл-эффекта, Р. Пайерлс—В. Гейзенберг, 1929—1931 г.г.), процессов (при исследовании роли воли решетки в механизме тепло- и электросопротивления, Р. Пайерле, 1929—1930 г.г.), скалярной эффективной массы электрона (в связи с представлением о приведении зоп, Л. Бриллюэн. 1930 г.). Поэтому 1928— 1931 г.г. явились периодом формирования основных понятий и представлений зонной теории электропроводности металлов.

1931—1934 г.г. составили этап распространения зонной теории электропроводности металлов на диэлектрики и полупроводники и создания единой зонной теории электропроводности твердых тел. Можно проследить 151 как спорадические работы по изучению отдельных полупроводниковых свойств неметаллических кристаллов XIX столетия к концу 20-х г.г. постепенно оформились в несколько важных направлений (исследование фотопроводимости, температурной зависимости электропроводности, структурно-чувствительных и конзактных свойств), из синтеза которых родилась физика полупроводников. Решающее значение для ее превращения в са-

никновения современного квазичастичного подхода́ к проблеме кристаллов, который явплся естественным завершением инвариантной смены представлений атомной теории твердых тел об индивидуальном и коллективном поведении микрочастиц в решетке. В этом синтезе — воплощение рационального содержания предыдущего развития атомной теории твердых тел и залог ее дальнейших успехов, а зонная теория суть его необходимый логический элемент.

Необходимо подчеркнуть, что круг затронутых в работе вопросов и список цитированной литературы не претендуют на исчернывающую полноту. Цель работы будет достигнута, если предпринятая здесь попытка выяснения процесса развития атомной теории твердых тел послужит дальнейшему изучению этой важной проблемы.

#### Результаты работы доложены и обсуждены на:

семинаре сектора истории физики ИИЕнТ АН СССР, Москва, 1958 г.:

заседании секции истории физики Советского Национального Объединения историков естествознания и техники, Москва, 1959 г.;

научной конференции кафедр КГПИ им. А. М. Горького, Киев, 1959 г.;

Всесоюзной конференции по истории физико-математических наук, Москва, 1960 г.;

Всесоюзной конференции по истории физико-математических наук, Москва, 1963 г.;

заседании секции истории физики Украинского отделения Советского Национального Объединения историков естествовнания и техники, Киев, 1967 г.;

Всесоюзной конференции по истории физико-математических наук, Тамбов, 1968 г.

Основное содержание диссертации опубликовано в печатных работах:

- 1. В. М. КОНОВАЛОВ, В. А. ДУБЧАК, Вклад радянської науки в розвиток фізики напівпровідників. Наукові записки КДПІ ім. О. М. Горького, 27, 211 (1957).
- 2. В. А. ДУБЧАК. Нарис історії вин'якнення і розвитку теорії твердого тіла. Наукові Записки КДПІ ім. О. М. Горького, 30, 3, (1958).
- 3. В. М. КОНОВАЛОВ, В. А. ДУБЧАК. Основні етапи розвитку квантової статистики. Звітно-наукова конференція кафедр КДПІ ім. О. М. Горького. Тези доповідей. стор. 73, Київ, 1959 р.
- 4. В. М. КОНОВАЛОВ, В. А. ДУБЧАК, О развитии квантовой стагистики. Сб. «Вопросы истории естествознания и техники», Изд. АН СССР, в. 10, 35 (1960).
- 5. В. М. КОНОВАЛОВ, В. А. ДУБЧАК. Очерки по истор и физики полупроводников. Труды НИЕнТ АН СССР, 34, 73 (1960).
- 6. В. А. ДУБЧАК, В. М. КОНОВАЛОВ. Основные этапы развития зонной теории твердых тел. Сб. «История и методология естественных наук». Изд. МГУ им. М. В. Лемоносова, в. 4, 220 (1966).
- 7. В. А. ДУБЧАК. Основные этапы развития атомной теор иствердых тел на базе иден квантов. Сб. «Вопросы истории физико-математических наук», Тамбов, 1968 г., стр. 101.
- 8. В. А. ДУБЧАК, В. М. КОНОВАЛОВ. Шляхи розвитку квантової теорії твердих тіл у післявоєнній період. Зб. «Питання історії фізики». Вид. АН УРСР, 1968 р. (в печати).