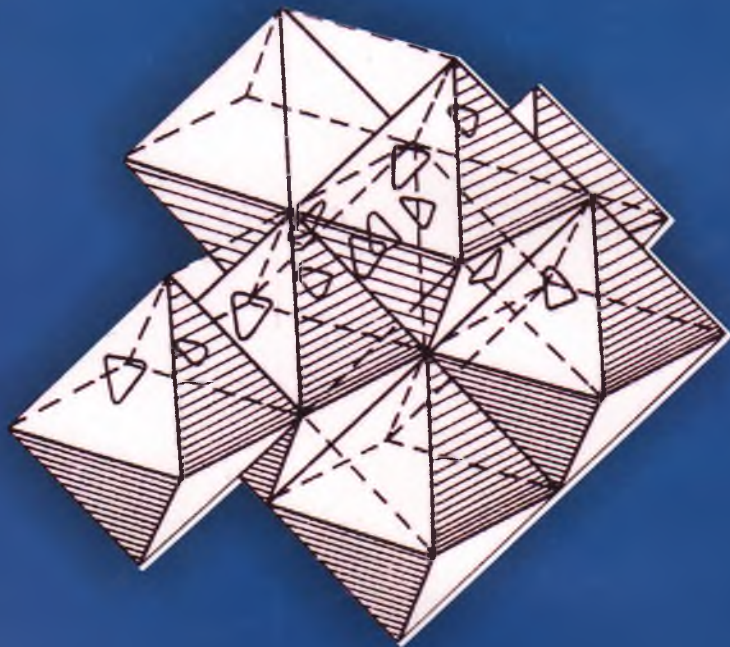


S. ZAYNOBIDDINOV,
SH. YO'LCHIYEV, D. NAZIROV,
M. NOSIROV

YARIMO'TKAZGICHLARDA ATOMLAR DIFFUZIYASI



Kitob quyida ko'rsatilgan
muddatda topshirilishi shart

Oldingi foydalanishlar miqdori	

22.379

Z 11

S. Zaynobiddinov, Sh. Yo'lchiyev,
D. Nazirov, M. Nosirov

YARIMO'TKAZGICHLARDA ATOMLAR DIFFUZIYASI

*O'zbekiston Respublikasi Oliy va o'rta maxsus ta'lim vazirligi
tomonidan 5140200 – «Fizika» ta'lim yo'nalishi talabalari
uchun o'quv qo'llanma sifatida tavsiya etilgan*

«O'zbekiston faylasuflari milliy jamiyati» nashriyoti
TOSHKENT – 2012



UDK: 537.31(075)

KBK 22.379

Z-11

Zaynobiddinov S.

Yarimo'tkazgichlarda atomlar diffuziyasi: o'quv qo'llanma.

S. Zaynobiddinov, Sh. Yo'lchiyev, D. E. Nazirov, M. Nosirov.

Toshkent: O'zbekiston faylasuflari milliy jamiyati nashriyoti, 2012.

1. Sh. Yo'lchiyev,
2. D. Nazirov,
3. M. Nosirov

UDK: 537.31(075)

KBK 22.379.

Z-11

Taqrizchilar:

M.K. Bahodirxonov — fizika-matematika fanlari doktori,
professor.

I.N. Karimov — fizika-matematika fanlari doktori,
professor.

Mas'ul muharrir:

A.T. Teshaboev — fizika-matematika fanlari nomzodi,
professor.

O'quv qo'llanmada zamonaviy mikroelektronikaning asosini tashkil etuvchi yarimo'tkazgichlarda atomlar diffuziyasining nazariy asoslari, kristallarning tuzilishi, ulardagi nuqsonlar turlari va tabiati, asosiy yarimo'tkazgichli modda - kremniydagi elementlar diffuziyasi qonuniyatlari va tajriba natijalari tavsiflangan.

O'quv qo'llanma yarimo'tkazgichlar va dielektriklar fizikasi, qattiq jismlar fizikasi, mikroelektronika, elektron asbobsozlik kabi maxsus kurslar dasturlari asosida yozildi va shu sohada ta'lim olayotgan talabalar, magistrlar, tadqiqotchilar, ilmiy xodimlar, mutaxassis va pedagoglar uchun mo'ljallangan.

ISBN 978-9943-391-40-6

KIRISH

Texnikaning ko'pgina sohalaridagi (radioaloqa, televideniye, avtomatika, hisoblash texnikasi, mudofaa texnikasi, kosmik aloqa va boshqalar) jadal rivojlanishni yarimo'tkazgichlar fizikasining yutuqlarisiz, yarimo'tkazgichli asboblarsiz tasavvur qilish mumkin emas edi.

Yarimo'tkazgich moddalarga solishtirma qarshiligi jihatidan elektr tokini yaxshi o'tkazuvchi o'tkazgichlar bilan elektr tokini amalda o'tkazmaydigan izolyatorlar (dielektriklar) oralig'ini egallaydigan moddalar kiradi.

Yarimo'tkazgichlarga D.I.Mendeleyevning elementlar davriy sistemasida ixcham guruhni tashkil etuvchi 12 ta kimyoviy element hamda ko'pgina anorganik va organik birikmalar kiradi.

Yarimo'tkazgich moddalar va ular asosida tayyorlanadigan asboblar va qurilmalar tobora keng ko'lamda qo'llanilmoqda. Buning asosiy sabablari yarimo'tkazgich moddalarning ajoyib xossalaridir: yarimtkazgichlar turli tashqi ta'sirlarga juda sezgir, ular zaminida ishlab chiqarilayotgan asboblarning o'lchamlari kichik, ishlash muddati katta va bajariladigan xizmatlar doirasi juda keng. Shu bilan bir vaqtda ular turli zarbalarga chidamlidir.

Binobarin, yarimo'tkazgich moddalar va asboblarni tadqiq etish, ularning imkoniyatlarini kengaytirish hamda yangi xossalarini kashf qilish masalalari hozirgi zamon fanida muhim o'rin tutadi. Ulardan oqilona va samarali foydalana olish bugungi kunda har bir o'qimishli va ziyoli inson uchun suv va havodek zarur bo'lib qolmoqda. Shu nuqtayi nazardan qaraydigan bo'lsak, yarimo'tkazgichlar, ularda elektr toki, yarimo'tkazgichli materiallar va asboblarning ishlash prinsipini o'rganish naqadar dolzarb masala va muammolarni hal etishga bag'ishlanganligi o'z-o'zidan ma'lum bo'ladi.

Yarimo'tkazgich moddalar asosida tayyorlanadigan asboblar, qurilmalar, sanoatda, qishloq xo'jaligida, transportda, elektronkada, mikroelektronkada, komp'yuterlarda, energiyani bir turdan ikkinchi turga almashtirishda, aloqada, informatikada, maishiy xizmat sohasida va jamiyat faoliyatining boshqa barcha jabhalarida turli-tuman muhim vazifalarni bajarmoqda.

Mamlakatimizda yarimo'tkazgichli asboblar fizikasi yo'nalishlarida fanlar akademiyasi institutlarida, oliy o'quv yurtlari laboratoriyalarida jiddiy, samarali, ilmiy-amaliy tadqiqotlar jahon fani saviyasida olib borilmoqda.

Zamonaviy elektron asboblar — integral sxemalar, mikroelektron asboblar yaratishning asosiy texnologik bazasi — yarimo'tkazgichlarni legirlash usuli bilan uning hususiyatlarini maqsadga yo'nalgan holda

boshqarish, atomlar diffuziyasi usulida zaruriy funksional elementlar hosil qilish muhim jarayonga aylandi.

Nanotexnologiyalarning tez sur'atlar bilan elektron asboblari ishlab chiqarishga kirib borishi atomlar diffuziyasi jarayonlarini tadqiq qilishning yana ham dolzarbligini tasdiqladi.

Diffuzion texnologiyalarning oxirgi yillarda yarimo'tkazgichli asboblari ishlab chiqarishda keng qo'llanilishi kristallarda atomlar diffuziyasi jarayonlarining nazariy va amaliy tadqiqotlarni rivojlanishiga olib keldi. Bunday izlanishlar yarimo'tkazgichlarda atomlar harakatining va ularni kristall nuqsonlari bilan hamda o'zaro ta'sirlashuv qonuniyatlarini aniqlash kabi qattiq jismlar fizikasining fundamental masalalari bo'yicha ma'lumotlar to'plash bilan birga yangi turdagi mikroelektron asboblari va integral sxemalar olish texnologiyalarini yaratishga ham omil bo'ldi.

Bu sohada ko'plab ilmiy maqolalar va risolalar chop ettirilganiga qaramay hozirgacha yarimo'tkazgichli moddalarda nuqsonlarning turlari, ularni hosil qiluvchi tashqi kuchlarni ta'sir mexanizmlari, kirishma atomlarning kristall panjarasidagi holatlari haqida yagona bir tasavvurlar mavjud emas. Nuqsonlarga va kirishma atomlarga g'oyat sezgir yarimo'tkazgichlarda atomlar diffuziyasining nazariy asoslari va ular bilan bog'liq bo'lgan, fan va amaliyot uchun zarur bo'lgan hodisalar mohiyatini hamda ular imkoniyatlaridan to'laroq foydalanish sharoitlari yetarlicha o'rganilmagani uchun olimlar va mutaxassislarni bu sohaga qiziqishlari susaymayapti.

Shu munosabat bilan yarimo'tkazgichli moddalarda nuqtaviy nuqsonlar hosil bo'lishi mexanizmlarini, kirishma atomlar diffuziyasining nazariy asoslarini hamda ular bilan bog'liq holda yuzaga keluvchi ayrim effektlarni o'rganish va mavjud ma'lumotlarni tahlil etish maqsadida ushbu qo'llanma tayyorlandi.

Qo'llanmada zamonaviy mikroelektronikaning asosini tashkil etuvchi yarimo'tkazgichlarda atomlar diffuziyasining nazariy asoslari, kristallarning tuzilishi, ulardagi nuqsonlar turlari va tabiati, asosiy yarimo'tkazgichli modda — kremniydagi elementlar diffuziyasi qonuniyatlari va tajriba natijalari tavsiflangan.

Qo'llanma haqida o'z fikr-mulohazalarini bildiruvchi o'rtoqlarga mualliflar oldindan minnatdorchilik bildiradilar.

1-BOB. YARIMO‘TKAZGICHLAR HAQIDA UMUMIY MA’LUMOTLAR

1.1. Yarimo‘tkazgichlar fizikasining rivojlanish tarixidan

Bugungi kunda fan va texnika sohasida eng tez taraqqiyot qilayotgan fan — bu yarimo‘tkazgichlar fizikasidir. Bunga sabab, yarimo‘tkazgichli asboblarning inson faoliyatining barcha sohalarida — tibbiyotdan to kosmik tadqiqotlargacha keng qo‘llanishidir. Bunday tez taraqqiyotga yarimo‘tkazgichli materiallarning fizik xossalarini uzoq va chuqur tekshirishlar olib keldi. 1900 yildan boshlab jahonning turli davlatlarining olimlari metall-yarimo‘tkazgich nuqtaviy kontaktini detektorlash-to‘g‘rilash xossalarini o‘rgana boshladilar. Bunda asosan yarimo‘tkazgich material sifatida kremniy karbidi, kremniy, tellurlar ishlatildi. 1922-yilda manfiy differensial qarshilikka ega bo‘lgan kontaktlar aniqlandi va o‘rganildi. Bular asosida qattiq jism elektr tebranishlari generatorlari yaratildi. 1937-yilda esa eksperimentlar asosida har xil turdagi yarimo‘tkazgichlar chegarasida tokni to‘g‘rilash nazariyasi vujudga keldi. 1940-yilda esa bu nazariya ko‘p sonli eksperimentlarda tasdiqlandi.

Shu davrdan boshlab, turli turdagi yarimo‘tkazgich-yarimo‘tkazgich kontaktidagi oraliq qatlamda bo‘ladigan jarayonlar o‘rganila boshlandi. Lekin, qator eksperiment natijalari metall-yarimo‘tkazgich kontaktidan o‘tuvchi tok nazariyasiga mos emas edi. 1947-yilda yarimo‘tkazgich yuzasida, u boshqa yarimo‘tkazgich va metall bilan kontaktda bo‘lmagan holda ham, elektron holatlar mavjudligi haqidagi fikr ilgari surildi. Bu asosida ikkita yarimo‘tkazgich kontaktidan tok o‘tish mexanizmining nazariyasi vujudga keldi va u keng tarqalib, eksperiment natijalariga mos natijalarni berdi. Bu nazariya zamonaviy yarimo‘tkazgichli to‘g‘rilagichli diodlarning ishlash mexanizmiga asos bo‘ldi.

Turli turdagi ikki yarimo‘tkazgich chegarasida katta elektr maydon bo‘lgandagi jarayonlarni o‘rganish $p-n$ o‘tishning teshilish nazariyasini vujudga kelishiga va bu asosda ishlovchi yarimo‘tkazgichli asbob-stabilitronning yaratilishiga olib keldi. Shu jumladan, ikkita yarimo‘tkazgich kontaktini yorug‘lik energiyasini elektr energiyasiga aylantirishda qo‘llash mumkinligi ko‘rsatildi. Bu tamoyilda ishlab chiqilgan fotoelementlar yorug‘lik signallarini qayd qilishda hamda fotoenergetikada qo‘llanilmoqda.

1948-yilda qattiq jisimli yarimo‘tkazgichli kuchaytirgich-tranzistor yaratildi. Bu asbobning ishlash asosini ikkita o‘zaro yaqin joylashtirilgan $p-n$ o‘tishlarning o‘zaro ta’siri tashkil etadi va tok o‘tkazish jarayonida

Ikki ishorali zaryad tashuvchilar — elektron va kovaklar ishtirok etadi. 1952-yilga kelib, nuqtaviy va yassi biqutbiy tranzistorlar kabi yarimo'tkazgichli asboblari yaratildi. Keyinchalik biqutbiy yarimo'tkazgichli tranzistorlarning kuchaytirish xususiyatlarini yaxshilash, ishchi chastota diapazonini kengaytirish hamda ish quvvatini oshirish borasida tadqiqotlar olib borildi.

50-yillarning oxirida o'zaro yaqin joylashtirilgan uchta $p-n$ o'tishlarning o'zaro ta'siriga asoslangan yarimo'tkazgichli asbob — tranzistor ishlab chiqildi. Tranzistorlarning asosiy ishlatilish sohasi — bu kichik inersiyali quvvatli toklarni kommutatsiya qilishdir.

Yarimo'tkazgichlar yuzasida va yarimo'tkazgich-dielektrik faza chegarasidagi fizik jarayonlarni chuqur o'rganilishi uni polyar yoki maydonli tranzistorlarning yaratilishiga olib keldi. Bu tranzistorlarda zaryad tashuvchilar bir xil ishorali bo'lib, tranzistordan o'tuvchi tok kattaligi zatvorga qo'yiluvchi elektr maydon kuchlanganligiga bog'liq.

Oxirgi bir necha o'n yillarda elektron texnikaga bo'lgan talab yarimo'tkazgichlarning funksional imkoniyatlarini oshirish va ularning o'lchamlarini kichraytirish — integral mikrosxemalarning yaratilishiga olib keldi. Keyingi tadqiqotlar esa nanoo'lchamdagi tranzistor strukturalarini yaratish imkonini tug'dirdi.

Yarimo'tkazgichli asboblari shunday katta tezlikda rivojlantirilmoqdaki, bugungi tasavvur va yutuqlar bir necha yildan so'ng eskirib qolmoqda. Shu sababli, yarimo'tkazgichli asboblarda ro'y beruvchi fizik jarayonlarni bilish muhim ahamiyatga egadir.

Yarimo'tkazgichlar fizikasini o'qitish borasida dastlabki o'zbek tilidagi elektron o'quv qo'llanmalari, laboratoriya sharoitida ko'zga ko'rinmaydigan jarayonlarni ko'rsatish imkonini beradigan virtual stendlar va multimediali dasturiy mahsulotlar yaratilmoqda.

Yarimo'tkazgichlar o'tkazuvchanligining ikki turli bo'lishi (elektronli va kovakli), ular qarshiligining temperaturaga va yoritilganlikka bog'liqligi, diodli qurilmalarda doimiy tokning bir tomonlama o'tishi va o'zgaruvchan tokning to'g'rilanishi kabi tushunchalarni mustahkamlashga bog'liq mantiqiy masalalarni tuzish va ularni yechish uslubidan ta'lim jarayonida foydalanish maqsadga muvofiqdir.

Yarimo'tkazgichlar qo'llanmayotgan soha hozir topilmaydi. Binobarin, yarimo'tkazgich moddalar va asboblarni tadqiq etish, ularning imkoniyatlarini kengaytirish hamda yangi xossalarni kashf qilish masalalari hozirgi zamon fanida muhim o'rin tutadi.

1.2. Yarimo'tkazgichlarning asosiy hossalari

Uzoq vaqtlargacha fizikada eng qiziqarli masala — bu mikroduyo va makrokosmosni tadqiq qilishdan iborat deb hisoblanardi. Aynan shu sohalarida bizni qurshagan dunyoning tuzilishini izohlashga oid eng muhim, fundamental savollarga javoblar topishga harakat qilinardi. Mana endi tadqiqotlarning uchinchi fronti vujudga keldi — qattiq jismlarni o'rganishga kirishildi.

O'zlarining elektron xossalari bo'yicha qattiq jismlar metallarga, dielektriklarga va yarimo'tkazgichlarga ajraladi. Bundan tashqari, past temperaturalarda maxsus o'ta o'tkazuvchanlik holati mavjud bo'lib, bu holatda elektr tokiga qarshilik nolga teng bo'ladi.

Mikrozarralarning harakati kvant mexanika qonunlariga bo'ysunadi. Masalan, atomdagi bog'langan elektronlarda energiya faqat aniq, kvantlangan qiymatlar olishi mumkin. Qattiq jismda bu energiya sathlari taqiqlangan energiya sohaları bilan ajralgan zonalarga uyushadi. Pauli prinsipiga ko'ra, elektronlar pastki sathda yig'ilib qolmay, turli energiya sathlarida joylashadi. Buning natijasida zonadagi barcha energiya sathlari to'ldirilishi mumkin. Bunday qattiq, jism dielektrik bo'ladi. Bundagi elektron energiyasini faqat birdaniga eng oxirgi kattalikkacha (taqiqlangan soha kengligicha, yoki, odatda aytilishicha, energiya tirqishigacha) o'zgargirish mumkin. Shuning uchun dielektrikdagi elektronlar elektr maydonida tezlasha olmaydi va nolinch temperaturalarda (issiqlik uyg'otishlar bo'lmaganda) o'tkazuvchanlik nolga teng bo'ladi (qarshilik cheksizdir).

Metallarda, aksincha, energiyaning yuqorigi to'lgan sathi zona ichida yotadi, elektronlar energiyasi deyarli uzluksiz o'zgarishi mumkin va elektr maydon tok hosil qiladi. Elektronlarning maydon bo'ylab tartiblangan harakatiga intensiv tartibsiz harakat qo'shiladi. Elektronlarning maksimal energiyasi ularning konsentratsiyasi bilan belgilanadi. Tipik metallarda bu kattalik elektron-volt tartibidadir. Bu energiyaga mos temperatura $\sim 10^4$ K. Shu sababli, hatto absolyut nolda ham metallardagi elektronlarning bir qismi keskin harakatlanadi va g'oyat yuqori effekti temperaturaga ega bo'ladi.

Yarimo'tkazgich — kichik energiya tirqishiga ega bo'lgan dielektrik. Issiqlik harakati elektronlarni erkin zonaga (uni to'lgan valent zonadan farqli ravishda o'tkazuvchanlik zonasi deyiladi) «uloqtirib» chiqargandan so'ng, u yerda ular elektr maydonda tezlashadi. Shu sababli, odatda, yarimo'tkazgichlar temperaturaga keskin bog'liq bo'lgan kichik o'tkazuvchanlikka ega bo'ladi. Yarimo'tkazgich o'tkazuvchanligiga, shuningdek, maxsus kirishmalar kiritish orqali ta'sir ko'rsatish mumkin.

Yarimo'tkazgich kristallar murakkab elektron yarimo'tkazgich asboblari, jumladan integral sxemalar deb ataladigan asboblari yaratish imkonini

beradi. Hozirgi paytda shunday integratsiya darajasiga erishilganki, millionlab alohida elementlar 1 sm^2 yuzada joylashishi mumkin. Bunday qurilma xuddi yagona kristallni hosil qiladi va shuning uchun ham texnikaning yangi sohasini bejiz qattiq jism elektronikasi deyishmaydi.

Qattiq jism qanchalik murakkab tuzilgan bo'lsa, kollektiv effektini oshkor qilish shunchalik qiyindir. Organik qattiq jismlar, ayniqsa, murakkab tuzilgan bo'lsalarda, ularda ham muayyan struktura mavjud. Bu yerda tartiblanish qanday vujudga keladi, — u qanday kollektiv xossalarga olib keladi, bu savollar hali javobini kutadi. Biroq jonli tabiat sirlarini tushunib olishning kaliti aynan shu yo'lda yotganligi ayondir.

Yarimo'tkazgichlar — elektr tokini yaxshi o'tkazuvchi moddalar (o'tkazgichlar, asosan metallar) va elektr tokini amalda o'tkazmaydigan moddalar (izolyatorlar yoki dielektriklar) orasidagi oraliq vaziyatni egallagan modda—lar sinfi. Yarimo'tkazgichlarning xossalari va xarakteristikalari ularning tarkibidagi kirishmalarning mikroskopik miqdoriga kuchli bog'langandir. Yarimo'tkazgich tarkibidagi kirishma miqdorini protsentning o'n millionli ulushlaridan to 0,1 — 1% gacha o'zgartirib, uning elektr o'tkazuvchanligini millionlarcha marta oshirish mumkin. Yarimo'tkazgichlarning boshqa bir muhim xossasi shundaki, ularda elektr tokini o'tkazishda faqat manfiy zaryadlar — elektronlar emas, balki (qiymati elektron zaryadiga teng) musbat zaryadlar — kovaklar ham qatnashadi.

Agar hech qanday kirishmalar mutlaqo bo'lmagan ideal yarimo'tkazgich kristallni olsak, uning elektr tokini o'tkazish xususiyati xususiy elektr o'tkazuvchanlik deb ataluvchi kattalik bilan aniqlanadi.

Yarimo'tkazgich kristallda atomlar tashqi elektron qobig'i elektronlari yordamida o'zaro bog'langan. Atomlarning issiqlik tebranishlari vaqtida issiqlik energiyasi bog'lanish hosil qiluvchi elektronlar orasida notekis taqsimlangan bo'ladi. Ayrim elektronlar o'z atomidan «uzilib ketish» va kristallda erkin ko'cha olish imkonini beradigan yetarli miqdordagi issiqlik energiyasiga ega bo'lib olishi mumkin (boshqacha aytganda, ular o'tkazuvchanlik zonasiga o'tadi). Elektronning bunday «uzilib ketishi» atomning elektr neytralligini buzadi, unda «ketib qolgan» elektron zaryadiga miqdoran teng musbat zaryad vujudga keladi. Elektronidan bo'shab qolgan bu holatni kovak deyiladi. Bo'sh holatni (vakant joyini) qo'shni bog'lanishdagi elektron egallashi mumkin bo'lgani sababli kovak ham kristall ichida ko'chib yura oladi va u musbat zaryadli tok tashuvchilik vazifasini o'taydi. Tabiiyki, bunday sharoitda elektronlar va kovaklar teng miqdorda vujudga keladi va bunday ideal kristallning elektr o'tkazuvchanligini ham musbat, ham manfiy zaryadlar bir xilda belgilaydi.

Agar asosiy yarimo'tkazgich atomi o'rniga tashqi elektronlar qobig'ida

asosiy yarimo'tkazgich atomiga nisbatan bitta elektron ortiq bo'lgan kirishma atomi joylansa, u holda bunday elektron kristalldagi atomlararo bog'lanish tashkil qilish uchun kerakmasdek, o'z atomi bilan zaif bog'langandek bo'lib qoladi. Uni o'z atomidan ajratib yuborish va erkin elektronga aylantirish uchun yakka atomdan ajratish uchun kerak bo'ladiganidan o'nlar marta kam energiya yetarlidir. Bunday kirishmalarga donor kirishmalar, ya'ni «ortiqcha» elektron beradigan kirishmalar deyiladi. Elektronidan ajralgan kirishma atomi, tushunarliki, musbat zaryadlanadi, ammo bu holda kovak paydo bo'lmaydi, chunki faqat atomlararo to'lmagan bog'lanishdagi elektron vakansiyasi kovak bo'la oladi, mazkur holda esa barcha bog'lanishlar to'ldirilgan. Bu musbat zaryad o'z atomi bilan bog'langanligicha (harakatsiz) qoladi va, binobarin, elektr o'tkazish protsessida qatnasha olmaydi. Yarimo'tkazgichga tashqi elektronlar qobig'ida asosiy modda atomiga nisbatan kamroq elektron bo'lgan kirishma kiritilsa, u to'lmagan bog'lanishlar, ya'ni kovaklar paydo bo'lishiga olib keladi. Yuqorida aytilganidek, bu vakansiyani qo'shni bog'lanishdagi elektron egallashi mumkin bo'lib, bunda kovak kristall bo'yicha erkin ko'chish imkonini oladi. Boshqacha aytganda, kovakning harakati elektronning bir qo'shni bog'lanishidan ikkinchisiga ketma-ket o'tishidir. Elektronni «qabul qiluvchi» bunday kirishmalarga akseptor kirishmalar deyiladi. U yoki bu tipdagi kirishmalar miqdori oshgan sari kristallning elektr o'tkazuvchanligi borgan sari ravshan ifodalanadigan elektron yoki kovak o'tkazuvchanlik bo'lib qoladi. Negativ va pozitiv degan lotin so'zlarining birinchi harflari bilan muvofiq ravishda elektron elektr o'tkazuvchanlikka n-tip, kovak elektr o'tkazuvchanlikka p-tip elektr o'tkazuvchanlik deyiladi. Shu yo'sinda mazkur yarimo'tkazgich uchun harakatchan zaryad tashuvchilarning qaysi tipi asosiy, qaysinisi asosiy emasligi ta'kidlanadi. Kirishmalar mavjudligidagi (ya'ni kirishmali) elektr o'tkazuvchanliklar kristallda avvalgidek ikki tipdagi tashuvchilar qolaveradi: yarimo'tkazgichga asosan kirishmalar kiritish hisobiga paydo bo'lgan asosiy tashuvchilar va issiqlik harakati taqozo qilgan asosiy bo'lmagan tashuvchilar bo'ladi. Muayyan yarimo'tkazgich uchun ma'lum temperaturada 1 sm^3 dagi elektronlar soni (konsentratsiyasi) n va kovaklar soni p ko'paytmasi o'zgarmas miqdorlari soni bo'lishini ta'kidlab o'tish lozim.

Bu kirishmalarni kiritish hisobiga mazkur tipdagi tashuvchilar konsentratsiyasini bir necha marta orttirib, boshqa tipdagi tashuvchilar konsentratsiyasini o'shancha marta kamaytirish demakdir. Yarimo'tkazgichlarning yuqorida bayon qilinganlardan kelib chiqadigan muhim xossasi ularning temperaturaga va nurlanishga kuchli sezgirligidir. Temperatura ko'tarilgan sari kristallda atomlarning tebranishlari o'rtacha energiyasi ortadi

va tobora ko'proq miqdorda bog'lanishlar uziladi. Tobora yangi va yangi elektronlar hamda kovaklar juftlari paydo bo'ladi. Yetarlicha yuqori temperaturalarda xususiy issiqlik o'tkazuvchanlik kirishma o'tkazuvchanligi bilan tenglashadi, hatto undan oshib ketadi. Kirishmalar konsentratsiyasi qancha yuqori bo'lsa, bu effekt shuncha yuqoriroq temperaturada sodir bo'ladi.

Agar yorug'lik kvantlari energiyasi yarimo'tkazgichdagi bog'lanishlarni uzib yuborish uchun yetarli bo'lsa, u holda yarim o'tkazgichli yorug'lik bilan nurlantirib ham bog'lanishlarni uzib yuborish mumkin. Turli yarimo'tkazgichlarda bog'lanishlarni uzish energiyasi turlicha, shuning uchun ular nurlanish spektrining u yoki bu uchastkasini turlicha sezadi.

Yarimo'tkazgichlarning bu eng muhim xossalaridan vazifasi va qo'llanish sohasi turlicha bo'lgan yarimo'tkazgich asboblari yaratishda foydalaniladi. Birinchi bo'lib amaliy qo'llana boshlangan yarimo'tkazgich material selen bo'lgan edi. Hozirgi vaqtda germaniydek yarimo'tkazgichni ortda qoldirib eng ko'p qo'llanilayotgan yarimo'tkazgich — bu kremniydir. Selen, germaniy va kremniy elementar yarimo'tkazgichlar, ya'ni D. I. Mendeleyev davriy sistemasi elementlari bo'lgan yarimo'tkazgichlar turkumiga taalluqli.

Germaniy va kremniy bilan bir qatorda davriy sistemaning III va V, II va IV, II va VI guruhlarini elementlarining murakkab birikmalari tobora keng qo'llanilayotir. Bu yerda, masalan, galliy bilan margimush (galliy arsenidi), galliy bilan fosfor, kadmiy, simob bilan tellur birikmalarini va boshqa birikmalarni esga olish lozim. Yarimo'tkazgichlarga zarur xossalar beradigan kirishmalar sifatida bor, fosfor, indiy, margimush, surma va boshqa ko'p elementlar ishlatiladi. Yarimo'tkazgichga kiritiluvchi kirishmalarning odatdagi miqdori prosentning o'nli va yuzli ulushlari orasida bo'ladi.

Muntazam kristall panjarali (monokristall) hamda kirishmaning zarur miqdori va taqsimoti qat'iy nazorat qilinuvchi yarimo'tkazgich kristallarni hosil qilish — maxsus tozalikka rioya qilingan sharoitda yuqori darajada aniq va murakkab asbob-uskunalar ishlatiladigan juda ham murakkab texnologik jarayon. Yuqorida bayon qilingan barcha jarayonlarni zonalar nazariyasi yordamida tushuntirish mumkin.

Qattiq jismlarning o'tkazuvchanligi kvant nazariyasi zonalar nazariyasiga asoslangan. Qattiq jismlarda elektronlar faqat muayyan qiymatli energiyalarga ega bo'la oladi. Sathlar zonalarini tashkil qiladi, ular bir-biridan zonaga tegishli energiya oraliqlari bilan ajralgan bo'ladi.

Metallarda zonalar yo o'zaro ustma-ust tushgan yoki elektronlar bilan chala to'ldirilgan bo'ladi. Metallarda ham elektr maydon ta'sirida elektron sathdan sathga erkin o'tadi, chunki zonadagi sathlar orasidagi masofa 10^{-28} eV, elektronning manbaning elektr maydonida oladigan energiyasi

esa $10^{-4} - 10^{-8}$ eV. Sathdan sathga o'tishning osonligi elektronning erkin harakatini bildiradi.

Yarimo'tkazgichlar va izolyatorlarda to'ldirilgan energiya zonasini bo'sh zonadan kengligi bir necha elektronvoltga yetadigan energiya tirqishi taqiqlangan zona ajratib turadi. Bu taqiqlangan zona orqali elektronlar issiqlik energiyasi hisobiga o'tib ketishi mumkin. Temperatura ortishi bilan bunday o'tishlar ehtimoli ortadi. Shuning uchun temperatura ko'tarilgan sari yarimo'tkazgichlar va dielektriklarning o'tkazuvchanligi oshadi, bu ularning metallardan muhim farqidir. Izolyatorlar va yarimo'tkazgichlarning bir-biridan farqi quyidagicha: izolyatorlarda taqiqlangan zona yarimo'tkazgichlardagidan keng. Bundan tashqari, yarimo'tkazgichlarda kirishma o'tkazuvchanligi muhim rol o'ynaydi, bu holda yarimo'tkazgichning kristall panjarasiga kirib olgan kirishma atomlari tufayli taqiqlangan zonada qo'shimcha sathlar paydo bo'ladi.

Metallarda solishtirma qarshilik (odatda, xuddi shu kattalik bilan qattiq jismning o'tkazuvchanlik xossalari xarakterlanadi) xona temperaturasida $1,6 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot m$ dan (kumushda) $1,2 \cdot 10^{-6} \Omega \cdot m$ gacha (vismutda) oraliqda bo'ladi. Yarimo'tkazgichlar turkumiga solishtirma qarshiligi 10^{-5} dan $10^8 \Omega \cdot m$ gacha bo'lgan materiallar kiradi. Izolyatorlar $10^{16} \Omega \cdot m$ gacha solishtirma qarshilikka ega bo'ladi. SI da o'tkazuvchanlik simens (Sm) birliklarda o'lchanadi. 1 Sm birlik 1 Ω qarshilikli elektr zanjir uchastkasining elektr o'tkazuvchanligidir.

1.3. Toza yarimo'tkazgich materiallar olish

Alohida toza yarimo'tkazgich materiallarni olish usullari juda ko'p. Biroq ularni eng samarali va ko'p qo'llaniladigan zonalari suyultirish usulidir. Kristallizatsion tozalov kirishmalarni segregatsiya hodisalari, ya'ni kirishmalarni suyuq va qattiq fazalarda eruvchanligi bir xil bo'lmasligiga asoslangan. Qattiq va suyuq fazalarda kontaktlanuvchi kirishmalar konsentratsiyasining nisbati taqsimot koeffitsiyenti deyiladi. Taqsimot koeffitsiyentining qiymati yarimo'tkazgich kirishmaning holat diagramasidan aniqlanadi. Bunda kirishma komponentini kiritish natijasida toza moddaning erish temperaturasi kamaysa, unda kirishmaning taqsimot koeffitsiyenti birdan kichik. Amalda bunday holat keng tarqalgan. Misol tariqasida, germaniy va kremniy juda ko'pchilik kirishmalarning taqsimot koeffitsiyenti birdan kichik. Shuning uchun yo'nalishli kristallanishda ular eritma hajmidan fazalar oralig'i chegaradan samarali qochadi. Germaniyni zonalari tozalash jarayoni vodorod, inert gazlar yoki inert gaz bilan vodorod aralashmasi atmosferasida o'tkaziladi. Tozalashga qo'yilgan quyma grafit qayiqchaga o'matilib, uni uzluksiz himoya gazi o'tib turgan kvarts trubaga joylashtiriladi.

Yuqori chastotali generator bilan ta'minlangan indikator yordamida kengligi 40-50 mm bo'lgan suyulgan kichik zona olinadi va tezligi 50-100 mkm/s bo'lgan aravacha quyma bo'ylab harakatlanadi. Quyma uzunligi 1000 mm va undan uzun bo'lishi mumkin. Talab darajasidagi tozalik bir yo'nalishga aravachani 5 — 8 marta o'tkazish bilan erishiladi. O'tishlar sonini oshirish bilan tozalik oshib ketmaydi, chunki qotishmadan va o'rab turgan atmosferada vaqt o'tishi bilan kirishmalarni kirish ehtimoligi oshib ketadi. Tozalov jarayonini tezlashtirish uchun quyma uzunligi bo'yicha suyultirish zonasini bir necha joyda hosil qilinadi. Bu holda qizdirgichni bitta o'tkazish bir necha o'tishga farqlanadi. Zonali suyultirishda taqsimot koeffitsiyenti birdan kichik bo'lgan kirishmalar suyuq zonada ushlanib qoladi va u bilan birga quymani dumi tomon to'planib qoladi. Japayon tugagandan so'ng quymani dumi kesib olinadi. Quymani sifati materialning solishtirma qarshiligini o'lchash bilan amalga oshiriladi. Yarimo'tkazgichli toza kremniyni olish texnologiyasiga quyidagi operatsiyalar kiradi:

1. Texnik kremniyni tozalovdan so'ng tiklanishi mumkin bo'lgan uchuvchi birikmaga aylantirish;
2. Birikmani fizik va kimyoviy tozalash;
3. Birikmani ajralgan toza kremniy bilan tiklanishi;
4. Oxirgi kristalizatsion tozalash.

Yarimo'tkazgichlar ishlab chiqarishda polikristal kremniy olishning keng tarqalgan usullaridan trixlorosilan SiHCl_3 ni vodorodli tiklanishidir. Trixlorosilan SiHCl_3 ni olish uchun 300 — 400 °C temperaturada maydalangan texnik kremniy quruq vodorod xloridida ishlovdan o'tkaziladi. Trixlorosilanning qaynash temperaturasi 320 °C dir. Shuning uchun u ekstraksiya, adsorbsiya va rektifikatsiya usullari bilan oson tozalanadi. Kremniyni vodorodli tiklanishi quyidagi sxema bo'yicha olib boriladi. Vodorod oqimi yordamida tozalangan xlorosilan bug'i bug'lantirgichdan tiklanish kamerasiga o'tkaziladi. Kamerada toza kremniydan tayyorlangan xamirturish maxsus tok o'tkazgichlar joylashgan. Bu tayoqchalar elektr toki yordamida 1200 — 1300 °C temperaturagacha qizdiriladi. Xamirturushga ajralgan kremniyning o'tirishi kerakli diametrdagi toza polikristalini beradi. Yarimo'tkazgichli monokristallar yarimo'tkazgichli asboblari va integral mikrosxemalarni yaratilishida katta ahamiyatga ega bo'lgan va bo'lib qolmoqda. Qatlamni legirlash kirishma elementini tashkil etuvchi bug' birikmalari yordamida amalga oshiriladi. Nisbatan uncha yuqori bo'lmagan ishchi temperatura va kristallanishni kichik tezligi epitaksial qatlamni yuqori tozalikda va takomillashgan strukturani olish imkonini beradi. Elektron-kovak o'tishli epitaksial qatlamni olish integral mikrosxemalarni izolyatsiyalash (ajratish) uchun keng qo'llaniladi.

Ko'pchilik xollarda integral mikrosxemalarni tayyorlashda kremniyli epitaksial qatlamlari monokristal dielektrik tagliklarga ham o'tqaziladi. Bunday tagliklar sifatida: sapfir (Al_2O_3), shpinel (MgO), berilliy oksidi (BeO), kvarts (SiO_2) va boshqa moddalardan ham foydalaniladi.

Dielektrik qatlamlarda kremniy epitaksiyasini olish integral mikrosxemalar elementlarini ideal izolyatsiyasini olish imkoniyatini yaratib beradi.

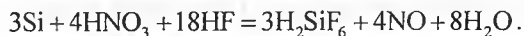
1.4. Kremniy va uning xossalari

Texnikada kremniyli fotoszgir asboblari keng qo'llaniladi. Bularga fotodiodlar, fotobatareyalar va fotodetektorlarni ko'rsatish mumkin. Quyosh energiyasini elektr energiyasiga aylantirishda qo'llaniladigan fotoelementlarni quyosh batareyalari deb ataladi. Fotobatareyalarning FIK ko'pchilik xollarda 10-12% ni tashkil qiladi. Kremniyli asboblarning ishchi temperaturalarini $-60 \div 200$ °C oralig'ida yotadi.

Kremniy (Si) — davriy sistemasining to'rtinchi guruh elementi bo'lib, Ya. Bertsellius tomonidan 1824-yil toza holda olingan. U yer qobig'ida eng ko'p tarqalgan elementlardan biri bo'lib, massa bo'yicha 29,5%ni tashkil qiladi va kisloroddan so'ng ikkinchi o'rinda turadi. Tabiatda kremniy faqat birikma (qum, tuproq, kremniy oksidi, silikat angdrid) holda uchraydi. Kremniy amorf va kristal holatda bo'ladi. Amorf kremniy zichligi $1 \cdot 10^3$ kg/m³ bo'lgan qo'ng'ir kukun, kristal kremniy — xuddi po'latdek yaltiraydigan metalmas modda. Toza kremniyni olish texnologiyasi ancha qiyin. Kremniy yarimo'tkazgichlar elektronikasida faqat tozalashning effektiv usullari topilgandan so'ng 50-yillardan qo'llanila boshlagan.

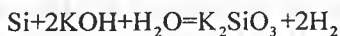
Yarimo'tkazgichli asboblari va tizimlari ishlab chiqarishda eng ko'p ishlatilayotgan modda kremniydir. U elementlari davriy tizimida 14-o'rinda turadi. Atom og'irligi 28, uning eng katta valentligi 4, suyulish temperaturasi (normal bosimda) 1414 °C, qattiq kremniyning zichligi 2,33 g/sm³, dielektrik singdiruvchanligi $\epsilon = 11,7$, diamagnetik.

Xona temperaturasida kremniy kimyoviy jihatdan barqaror, suvda erimaydi, ko'p kislotalarga nisbatan bardoshli. Ammo, u nitrat va ftorid kislotalar aralashmasida yaxshi eriydi:



Kremniyning sirtini tozalash maqsadida ishqoriy yediruvchilar qo'llaniladi. Silliqlash uchun yuqoridagi aralashma asosidagi yediruvchilar ishlatiladi.

Ishqoriy eritmalarda kremniy



reaksiya bo'yicha yaxshi eriydi.

Kremniy havoda 900 °C gacha qizdirganda barqaror qoladi. Ammo, yuqoriroq temperaturalarda oksidlanadi. Vodorod bilan kremniy 2000 °C chamasidagi temperaturada bevosita reaksiyaga kirishadi, $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$ silanlar hosil bo'ladi.

Azot bilan kremniy 1100-1300 °C da reaksiyaga kirishib, nitridlar hosil qiladi.

Kremniy galogenlar bilan oson ta'sirlashadi: fluor bilan xona temperaturasida, xlor bilan 200-300 °C da brom bilan 450-500 °C da, iod bilan 700 °C — 750 °Cda.

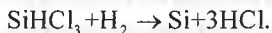
Suyulgan kremniy yuqori kimyoviy faollikka ega bo'ladi. Kremniy monokristallarini o'stirish uchun eng maqbul modda sintetik kvarts — SiO_2 dir.

Elektrik xossalari. Yarimo'tkazgichlarning elektrik o'tkazuvchanligi $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$ ifoda bilan tavsiflanishi ma'lum.

n-tur yarimo'tkazgichda o'tkazuvchanlik $\sigma_n = en\mu_n$, bunda (kirishma to'la ionlashadigan temperaturalarda) elektronlar zichligi n donor kirishma zichligi N_d ga teng, ya'ni N_d bo'lishi kerak edi. Bu tenglik kirishmalarining muayyan miqdorigacha saqlanadi. Ammo, kirishmalar zichligi yetarlicha yuqori bo'lganda bu tenglik saqlanmaydi ($n < N_d$ bo'ladi). Bu hodisani «legirlovchi kirishmalarining politropiyasi» deyiladi. Uning sababi — yetarlicha ko'p miqdorda yarimo'tkazgichga kiritilgan kirishma unda turli holatda bo'lishi mumkin. Masalan, kirishma yarimo'tkazgichning atomlari yoki uning tuzilishi nuqsonlari bilan birlashmalar hosil qilishi, tugunlar orasiga joylashishi va h.k. bo'lishidir. Bunday holatlarning birida kirishma kristalda elektrik faol, boshqalarida — neytral holatda bo'lishi mumkin. Politropiya hodisasi yuz bera boshlaydigan legirlovchi kirishmalar zichligini chegaraviy zichlik deyiladi. Undan yuqori zichliklarda yarimo'tkazgich kuchli legirlangan bo'lib qoladi.

Kremniyning (K) elektron (E) turdagi monokristallari fosfor(P) bilan legirlanadi, kovak turdagisi bor (B) bilan legirlanadi. Shuning uchun ularni KEP yoki KKB tarzida belgilanadi.

Kremniy trixlorosilanni vodorod bilan tiklab olinadi:



250 K dan yuqori temperaturalarda kremniy taqiqlangan zonasining temperaturaga bog'liqlik grafigi chizig'i, ya'ni $E_g = (1,205 - 2,84 \cdot 10^{-4}) \text{ eV}$.

Kremniy taqiqlangan zonasining kattaligi tufayli uning xususiy solishtirma qarshiligi Ge ga qaraganda 3 tartibga ortiq.

Davriy sistemaning III va V guruh elementlari mos ravishda akseptor

va donorlar bo'lib, ular taqiqlangan zonada sayoz sathlar hosil qiladi. Kremniyning dielektrik singdiruvchanligi kichik va zaryad tashuvchilar effektiv massasining katta bo'lishi sayoz donorlar va akseptorlarning ionlanish energiyasi katta va kirishmalar uchun 0,05 eV ga teng. Davriy sistemaning I, II, VI va VII guruh elementlari kremniyning taqiqlangan zonada chuqur sathlar hosil qiladi va muvozanatsiz zaryad tashuvchilar vaqtini chegaralaydi. Hozirgi vaqtda yarim o'tkazgichli integral mikrosxemalarni tayyorlashda va $p-n$ — o'tishlarni vujudga keltirishda elektr aktiv kirishmalarning diffuziyasi katta ahamiyatga ega. Kremniyda mustahkam bog'lanish yuqori, lekin oltin va rux tez diffuziyalanadi. Kremniy kristal panjarasidagi vakansiyalar akseptorlar bo'lib ular chuqur energetik sathlar hosil qiladi. Bu sathlar kremniyda taqiqlangan zonaning yuqori yarmida joylashgan.

Kremniyda ko'pchilik vakansiyalar neytral holatda bo'ladi. Shuning uchun ular bilan ion kirishmalar o'rtasidagi Kulon o'zaro ta'siri bo'lmaydi. Akseptorlarning ancha yuqori tezlikdagi diffuziyasi ularning atom radiuslarning kremniy atomlari o'lchashdan ancha katta farqlanishga bog'liq. Agar legirlangan kirishma konsentratsiyasi 10^{22} m^{-3} dan yuqori bo'lsa, uy temperaturasidagi zaryad tashuvchilarning ionlashgan kirishmalarda sochilishi asosiy rol o'ynaydi. Toza kremniy kristalida elektronlar harakatchanligi kovaklar harakatchanligidan uch marta ortiq. Kristallarda legirlovchi natijasida zaryad tashuvchilar harakatchanligi kamayishi solishtirma o'tkazuvchanlikning legirlovchi kirishma konsentratsiyasiga bog'liqligi noxizig'iy bo'lishiga olib keladi. Kremniy monokristalida zaryad tashuvchilar harakatchanligi kichikligi va kirishmalar eruvchanligi solishtirma qarshiligi $10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$ dan kichik kremniy olishni qiyinlashtiradi. Kirishma atomlari soni 10^{25} m^{-3} dan ortiq bo'lgan yarim o'tkazgichda turli birlashmalar va mikroajralishlarning ikkinchi fazasi hosil bo'ladi. Bu kirishmalarning elektr aktivligi o'zgarishiga olib keladi. Natijada zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi bilan donor akseptor konsentratsiyasi o'rtasida nomoslik hosil qiladi.

Takrorlash uchun savollar

1. O'tkazgich, dielektrik va yarim'tkazgichlarning asosiy farqlari nimada?
2. Kremniyning asosiy xossalarini ayting.
3. Toza kremniy olish texnologiyasi qanday?
4. Donor va akseptor kirishmalar deganda nimani tushunasiz?
5. Agar kremniyga milliondan bir ulushda donor kirishma kiritilsa, uning o'tkazuvchanligi qanday o'zgaradi?

2-BOB. YARIMO‘TKAZGICH KRISTALLARDAGI TUZILISH NUQSONLARI

Yarimo‘tkazgichlar fizikasini o‘z tarkibiga olgan qattiq jismlar fizikasining rivojlanishida qattiq jismlar tuzilishi haqidagi modeli tasavvurlar katta ro‘l o‘ynadi. Ular 1912-yilda rentgen nurlarining paydo bo‘lishi bilan tajribada o‘z tasdig‘ini topdi.

Bu qarashlarga asosan, amorf jismlardan farqli o‘laroq kristallar atomlar (ionlar)ning muntazam fazoviy joylashishi bilan xarakterlanadi va bunday fazoviy joylashish qattiq jismning kristall panjarasini hosil qiladi. Bu panjaraning tugunlarida joylashgan atomlar (ionlar) kvazi elastik kuchlari bilan bog‘langan va o‘zlarining muvozanat holati atrofida tinimsiz tebranib turadi.

Kristall panjarani o‘rganish kristall simmetriyasining barcha xossalarini saqlovchi eng kichik elementar hujayradagi atomlarning joylashishini bilish kifoya. Har bir kristallni aynan o‘xshash elementar kataklardan iborat uch o‘lchamli jism sifatida ko‘rib chiqish mumkin.

Kristall panjaraning fazoviy simmetriya masalalari zamonaviy kristallografiyaning muhim tarkibiy qismi hisoblanadi va qattiq jismlarning tarkibiy tahlili asosida yotadi. Geometrik jihatdan mumkin bo‘lgan 14 turdagi fazoviy panjara mavjud. Bu panjaralarni Brave panjaralari deb atash qabul qilingan bo‘lib, ular bir tekislikda yotmagan, bir nuqtadan chiquvchi birlik a, b, c vektorlar asosida tuziladi. Bu vektorlarning kattaligi va o‘zaro yo‘nalishiga qarab bir-biridan o‘z simmetriyasi bilan farq qiluvchi Bravening 14 panjarasi hosil bo‘ladi.

Bunday ideallashtirilgan tasavvurlar kristallarning bir qator xossalarini, elektronlar va rentgen nurlarining difraksiyasi, pyezoelektrik tovush tarqalishi, issiqlik sig‘imi, optik xossalar va boshqalarni tushuntirishda g‘oyatda qo‘l keldi. Bu tushunchalardan kristallarda elektronlarning energetik spektrini tushuntirish uchun kvant mexanikasida samarali foydalanildi.

Ammo, kristallning ideal tuzilishi haqidagi tasavvurlar tajribada kuzatiladigan ayrim muhim hodisalarni tushuntirib bera olmas edi. Shu boisdan haqiqiy kristallar tuzilishi nazariy va amaliy jixatdan tadqiqlanib, ularda qat‘iy davriylikdan chetlanishlar-tuzilish nuqsonlari mavjud bo‘lishligi aniqlandi.

2.1. Ideal va real kristallar

Tabiatdagi moddalar gaz, suyuqlik, qattiq jism va plazma holatlarida bo‘ladi. Bu holatlar moddaning agregat holatlari deb atalib, bir-biridan fizik hossalari bilan farq qiladilar. Qattiq jismlarning suyuqlik va gazlardan farqi shundaki. ular o‘z shakllarini saqlaydi va ularda

oquvchanlik kuzatilmaydi. Mikroskopik nuqtayi nazardan bunday farqning bo'lishi. moddani tashkil etuvchi atom va molekular orasidagi o'zaro ta'sir energiyasining katta yoki kichikligi bilan tushuntiriladi. Suyuqlik va gazlarda ularni tashkil qiluvchi atom va molekular orasidagi o'zaro ta'sirlashish energiyasi ularning issiqlik harakati energiyasidan kichik bo'ladi. Shuning uchun suyuqlik yoki gazni tashkil etuvchi atom molekular bir nuqtadan ikkinchi nuqtaga ko'chib yurishi mumkin, ya'ni oquvchanlik xossasiga ega. Qattiq jismlarda esa molekula yoki atomlar orasidagi ta'sirlashuv energiyasidan ancha katta bo'ladi. Shuning uchun ular erkin ko'chib yura olmaydi va muvozanat vaziyatlari atrofida tebranma harakat qilib turadi. Demak, qattiq jismni boshqa agregat holatlardan ajratib turuvchi asosiy farqlari: birinchidan, uning normal sharoitda o'z shaklining; ikkinchidan, ularni tashkil etuvchi atom molekularning tebranma harakatda bo'lishidir.

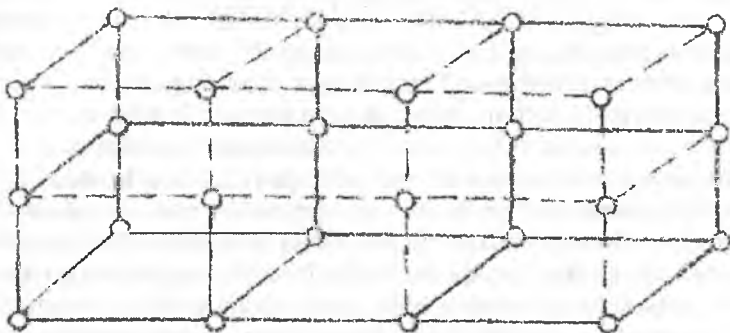
Qattiq jismlar tuzilishiga ko'ra amorf, kristall, shishasimon va polimer qattiq jismlarga uni tashkil qiluvchi atom yoki molekularning o'zaro bog'lanishiga ko'ra ham farqlanadi.

Kristall qattiq jismlarda ularni tashkil qiluvchi atom va molekular qat'iy tartib bilan joylashadi. Agar bu tartib ikki qo'shni atom yoki molekula orasidagi masofadan bir qancha marta katta bo'lgan masofalargacha saqlansa, uni uzoq tartib deb atлади. Kristallar aniq suyulish temperaturasiga (nuqtasiga) ega bo'ladi. Jism bu temperaturagacha qizdirilganda atomlar va molekular oquvchanlikka ega bo'lib qoladi. Suyulish nuqtasida tashqaridan olinayotgan issiqlik ta'sirida jism temperaturasi o'zgarmaydi va qattiq jism to'la suyuqlikka aylanguncha temperatura saqlanadi.

Kristallardagi atomlar va molekularning joylashish tartibi butun kristall bo'yicha saqlangan bo'lsa, bunday kristall monokristall deb ataladi. Hamma monokristallar anizotropiyaga ega, ya'ni ularning fizik hossalari turli yo'nalishlarda turlichadir. Monokristallarning makroskopik bo'lakchalarining tartibsiz birikishidan hosil bo'lgan kristall polikristall deb ataladi. Polikristaldagi monokristallarning tartibsiz joylashuvi natijasida uning fizik hossalari barcha yo'nalishlar bo'yicha bir hil bo'ladi. Bunday jismlar izotrop jismlar deb ataladi.

Mutloq nol temperaturada kristall atomlarining (masalan, uni tashkil qiluvchi har qanday zarralar) ning markazlari bir-biri bilan tutashtirilsa, fazoviy panjara hosil bo'ladi. uni kristall panjarasi deyiladi (2.1-rasm). Muvozanat nuqtalari esa kristall panjarasi tugunlari deb ataladi.

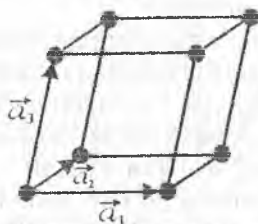
Kristall tuzilishga ega bo'lgan jismlarni tavsiflashda kristall panjarasi tugunlari tushunchasi muhim ahamiyatga egadir.



2.1-rasm. Kristall panjarasi.

Kristall panjarasining tuzilish qiyofasini saqlagan eng kichik bo'lagini elementar katak (elementar yacheyka) deb atлади. Odatda elementar katak parallelepipeddan iborat bo'ladi. Ushbu parallelepipedning uchta qirradi $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ bo'ylab vektorlarni yo'naltiramiz, bu vektorlar uzunliklari shu parallelepiped qirradi uzunligiga teng bo'lsin. Bunday vektorlar asosiy (translyatsion) vektorlar (yoki davrlar) deb ataladi (2.2-rasm).

Translyatsion vektorlarning asosiy hossasi shundan iboratki, bu vektorlar yordamida cheksiz kristalni $\vec{r} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ vektor bo'ylab ko'chirsak,



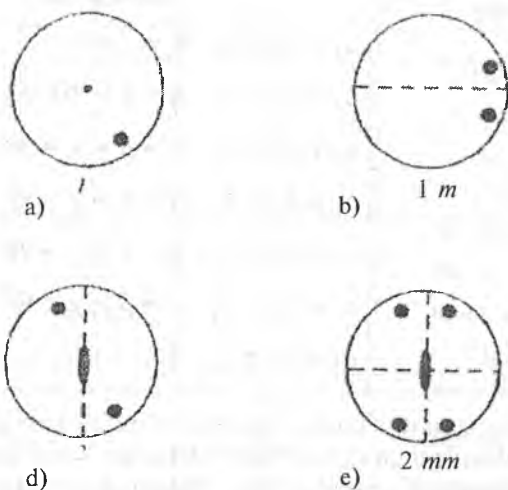
2.2-rasm. Elementar katak.

kristall o'z-o'ziga ustma-ust tushadi (n_1, n_2, n_3 - butun sonlar).

Ko'p hollarda bir qancha atomlar birikmalari kristall panjarasini hosil qiladi. Bunday takrorlanuvchi atomlar guruhini *bazis* deb ataladi. Ixtiyoriy kristalning bazisi va translyatsion vektorlari aniqlangan bo'lsa kristal panjarasi aniqlangan hisoblanadi.

2.2. Kristallarda simmetriya

Simmetriya deganda biz jismning ustida ma'lum bir amallarni (burish, siljitish, akslantirish) bajarganimizda jism o'z-o'ziga ustma-ust tushishi va barcha yo'nalishlarda fizik hossalarning avvalgidek o'zgarishsiz qolishini tushunamiz. Misol tariqasida 2.3-rasmda keltirilgan shakllar simmetriyasini ko'rib chiqamiz.



2.3-rasm. Shakllar simmetriyasi.

2.3-a rasmdagi shaklning biror o'qqa yoki tekislikka nisbatan simmetriyasi yo'q. Ushbu shakl faqat 360° burchakka burilganda o'zi bilan o'zi ustma-ust tushadi. Bunday quyi simmetriyaga ega bo'lgan jismlarni xalqaro belgilashda 1 raqami bilan belgilanadi va shakl birinchi tartibli simmetriya o'qiga ega deyiladi. 2.3-b rasmdagi shakl esa uzuq-uzuq chiziq bilan tasvirlangan tekislikka nisbatan simmetrik bo'ladi. bunday shakl simmetriyasi 1m ko'rinishda yoziladi. 2.3-d rasmdagi shaklni 180° ga ma'lum bir o'q atrofida burganimizda ustma-ust tushadi. ga burganda u ikki marta ustma-ust tushadi. 360° demak, ikkinchi tartibli simmetriya o'qiga ega — 3. Oxirgi shaklimiz ikkinchi tartibli simmetriya o'qiga va ikkinchi simmetriya tekisligiga ega, ya'ni — 2 mm. Kristallar ham simmetriyaga ega, ularning simmetriyasi kristall panjarasining simmetriyasidan kelib chiqadi. Kristallar elementar katakning tashkil etuvchilarini, ya'ni translyatsion vektorlarning uzunligiga va ular orasidagi

burchaklarning qiymatiga qarab 7 ta katta guruhga bo'linadilar. Bu guruhlarning har biri o'z nomiga ega bo'lib, *kristall singoniyalari* deb ataladi (2.1-jadvalga qarang).

2.1-jadval.

No	Kristall singoniyasi	Elementar katakni tavsiflovchi kattaliklar (parametrlar)
1	Triklin	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$
2	Monoklin	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
3	Rombik	$a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
4	Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
5	Kubik	$a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
6	Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$
7	Geksagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3 \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Kristall uchun mumkin bo'lgan barcha simmetriya amallari kristalning *simmetriya guruhini* tashkil qiladi. Simmetriya guruhlari ham ikki toifaga bo'linadi: *nuqtaviy va translyatsion*. Nuqtaga nisbatan akslantirish (inversiya), o'q atrofida burish va tekislikka nisbatan akslantirish bilan bog'liq bo'lgan simmetriya amallari *nuqtaviy simmetriya* guruhini tashkil qiladi. Kristalning tashqi simmetriyasini aniqlovchi bunday nuqtaviy simmetriya guruhlari soni 32 ta bo'lib ularning kristall singoniyalari bo'yicha bo'linishi 2.2-jadvalda keltirilgan.

Qattiq jismda kristall panjarasining mavjudligi 1,2,3,4,6-tartibli simmetriya o'qlaridan yuqori tartibli simmetriya o'qlari bo'lmisligiga olib keladi.

5-,7-tartibli simmetriya o'qi bo'lishi mokin emas, chunki besh va yetti burchakli shakl yordamida fazoni qoldiqsiz to'ldirib bo'lmaydi (ba'zi bir biologik kristallar bundan istisno). Boshqa simmetriya o'qlarini esa yuqoridagi simmetriya o'qlariga keltirilishi mumkin. Har bir simmetriya guruhi asosiy hosil qiluvchi simmetriya amallari bilan belgilanadi. Kristallar nuqtaviy simmetriyadan tashqari translyatsion simmetriyaga ham egadirlar. Kristall panjarasining mumkin bo'lgan 14 hil translyatsion simmetriya amali mavjud. Har bir translyatsion simmetriya amaliga bitta elementar katakni mos qo'yish mumkin.

№	Kristall singoniyalar i	Nuqtaviy guruhning belgilanishi		Nuqtaviy guruh nomi
		Xalqaro	Shenflis bo'yicha	
1	Triklın	1	C_1	Monoedrik Pinakoidal
		$\bar{1}$	C_1	
2	Monoklin	2	C_2	O'qli diadrik O'qsiz diadrik Prizmatik
		m	C_s	
		2/m	C_{2h}	
3	Rombik	222	D_2	Romb-tetraedrik Romb-piramidal Romb-dipiramidal
		mm	C_{2v}	
		mmm	D_{2h}	
4	Tetragonal	4	C_4	Tetragonal piramidal
		422	D_4	Tetragonal trapetsioedrik
		4/m	C_{4h}	Tetragonal dipiramidal
		4/mm	C_{4v}	Ditetragonal piramidal
		4/mmm	D_{4h}	Ditetragonal dipiramidal
		$\bar{4}$	S_4	Tetragonal tetraedrik
		$\bar{4}2m$	D_{2d}	Tetragonal skalenoadrik
5	Trigonal	3	C_3	Trigonal piramidal
		32	D_3	Trigonal trapetsioedrik
		3m	C_{3v}	Ditrigonal piramidal
		$\bar{3}$	C_{3i}	Romboedrik
		$\bar{3}m$	D_{3d}	Ditrigonal skalenoadrik

2.2-jadvalning davomi.

6	Geksagonal	$\bar{6}$	C_{3h}	Trigonal dipiramidal
		6m2	D_{3h}	Dimigonal dipiramidal
		6	C_6	Geksagonal piramidal
		622	D_6	Geksagonal trapetsioedrik
		6/m	C_{6h}	Geksagonal dipiramidal
		6/mm	C_{6v}	Digeksagonal piramidal
		6/mmm	D_{6h}	Digeksagonal dipiramidal
7	Kubik	23	T	Tritetraedrik
		$m\bar{3}$	T_h	Didodeksaedrik
		$\bar{4}3m$	T_d	Geksatetraedrik
		4332	O	Triontaedrik
		$m\bar{3}m$	O_h	Geksantloedrik

Natijada 14 xil elementar katak hosil bo'ladi. bu elementar kataklar *Brave panjaralari* deb ataladi. Translyatsion simmetriya – bu kristalni ma'lum bir vektor bo'yicha ko'chirganimizda o'zi bilan ustma-ust tushishidir. Har bir kristallar singoniyasida faqat ma'lum bir turdagi Brave panjarasi bo'lishi mumkin.

Kristall panjarasining to'liq simmetriyasini fazoviy simmetriya guruhi aniqlaydi. Fazoviy simmetriya guruhida kristalni nuqtaviy va translyatsion simmetriya amallari mujassamlashgan bo'ladi. Hammasi bo'lib 230 ta fazoviy guruhlar mavjud bo'lib, har qanday kristall o'z tuzulishiga ko'ra ana shu guruhlarining biriga mansub bo'ladi. Kristalning fazoviy simmetriya guruhi ma'lum bo'lsa, uning kristal tuzilishini keltirib chiqarish juda oson, shuning uchun kristalning simmetriya guruhini bilish muhim ahamiyatga ega. Hozirgi paytda kristall simmetriyasi rentgen nurlari yordamida aniqlanadi. Fanning ushbu yo'nalishi *kristalografiya* deb nomlanadi. 2.4-rasmdan ko'rinib turibdiki:

1. *Triklin singoniya* panjaralari faqat sodda P – shakldagi panjaralardir. Brave panjarasini ifodalovchi parametrlar soni 6 ta: uch qirra va uchta burchak.

2. *Monoklin singoniyada* ikkita Brave panjarasi shakllari bo'lishi mumkin. Ulardan biri P – shakldagi sodda katakka ega bo'lib, ikkinchisi esa, markazlashgan asosli ya'ni C – shakldagi katakka ega. Ushbu panjaralarni 6 ta parametr aniqlaydi $(a_1, a_2, a_3, \alpha, \beta, \gamma)$.

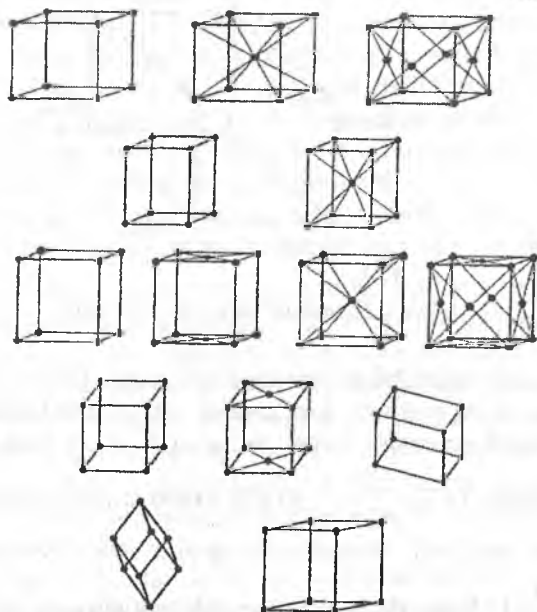
3. *Rombik singoniyada* to'rt xil Brave panjaralari mavjud bo'lishi mumkin; P – sodda, C – markazlashgan asosli. I – hajmiy markazlashgan, F – yoqliy markazlashgan turdagi panjaralar. Ushbu shakldagi panjaralar to'rtta parametr bilan aniqlanadi (a_1, a_2, a_3, α) .

4. *Tetragonal singoniya* ikki xil, ya'ni P va I shakldagi panjaralarga ega bo'lib uchta parameter bilan aniqlanadi ν .

5. *Trigonal singoniya* ikki parameter bilan aniqlanadi (a, a) bu singoniyada faqat P – shakldagi Brave panjarasi mavjud.

6. *Geksagonal singoniyada* bitta Brave panjarasi bo'lib, to'rt parameter bilan aniqlanadi. Ushbu katak C – shaklga mansub bo'lib ko'p hollarda uni uchta P – shakldagi sodda katak ko'rinishida ham ifodalanadi.

7. *Kubik singoniyada* uch xil katak bo'lishi mumkin: P , I va F shakldagi kataklar. Kubik singoniyani ikki parametr bilan aniqlash mumkin (a, a) .



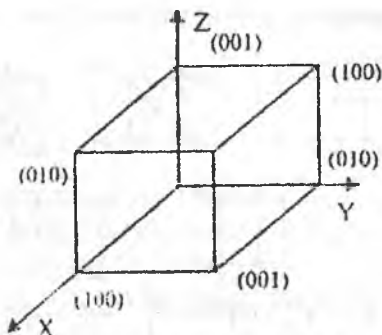
2.4-rasm. Kristall panjara turlari.

2.3. Miller indekslari

Kristallarning anizotropiyasi. ularda turli yo'nalishlarda fizik xossalarni turlicha bo'lishi. shu yo'nalishlarni farqlash uchun ma'lum bir belgilashlar zarur ekanligini ko'rsatadi. 2.4-rasmda kristall panjarasi tasvirlangan, undan ko'rinib turibdiki OO va OA kesib o'tuvchi tekisliklar turli yo'nalishga ega va ular translyatsion vektorlarga nisbatan turlicha joylashgan.

Bunday tekisliklarni farqlash uchun *Miller indekslari* belgilaridan foydalanamiz. Ushbu indekslar qanday topilishini quyida ko'rsatib o'tamiz. Koordinatalar o'qini shunday tanlab olamizki. ular elementar katakning translyatsion vektorlari bilan ustma-ust tushsin (2.5-rasm). Bizga (ABC) tekislik indekslarini topish kerak bo'lsin. Uning uchun dastlab biz tekislikni koordinata XYZ o'qlari bilan kesishgan joylarini aniqlab

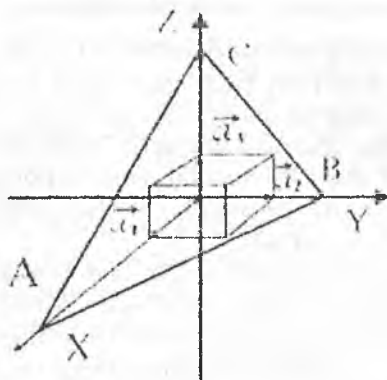
$m = \frac{OA}{a_1}, n = \frac{OB}{a_2}, p = \frac{OC}{a_3}$ sonlarini topamiz. Koordinata o'qlarini bir uzunlik birligi o'sha o'qda yotuvchi translyatsion vektor uzunligiga teng bo'ladi.



2.5-rasm. Elementar katak yo'nalishlari.

Bunday turli masshtabdagi koordinata o'qlarini tanlash, belgilashlarni osonlashtiradi. (m, n, p) sonlari topilgandan keyin o'sha tekislikning Miller indeksini aniqlash mumkin. Uning uchun (m, n, p) sonlarining teskari nisbatlari yoziladi. Ya'ni $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$ va shu nisbatga teng bo'lgan eng kichik butun sonlar yoziladi. Masalan u sonlar $h:k:l$ bo'lsin. Demak,

$h:k:l = \frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$. U holda (h, k, l) sonlar ABC tekislikning *Miller indekslari* deb ataladi.



2.6-rasm. Miller indeklari.

2.4. Real kristallar

Haqiqiy kristallarda ideal kristallardan farqli hamma vaqt kristall panjarasining ancha miqdordagi buzilishi mavjud bo'ladi. Dastavval makro va mikro nuqsonlarni farqlash lozim. Makronuqsonlar mikroskopda oson ko'rinadi. Bunday makronuqsonlarning misollari – metall quymalaridagi kovaklar, darzlar, yot moddalar kirishmalari uyimlari. polikristallning donachalari – ayrim kristallchalarning ko'rinma chegaralaridir. Elektronlar mikroskopiya sifatida paydo bo'lishi sanab o'tilgan nuqsonlarni ancha kichik o'lchamli bo'lganda ham kuzatish imkonini berdi.

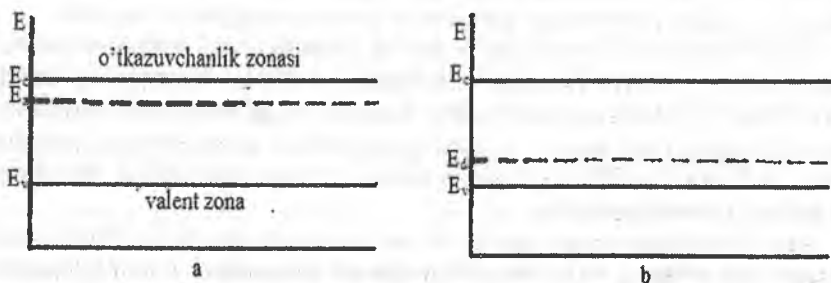
Mikronuqsonlarga yoki atomlar o'lchamida qaraladigan nuqsonlarga uch o'lchamdan (x, y, z) hech bo'lmaganda biri kristall panjarasining $a = 0,2 \div 0,5$ nm davri bilan taqqoslanuvchi bo'lgan nuqsonlar mansub bo'ladi. Ayrim ko'rinishdagi nuqsonlarni qarashdan oldin haqiqiy kristallni nuqsonsiz (ideal) kristalldan farqlovchi umumiy belgilarni topaylik.

Ideal kristallda atomlar qat'iy davriy joylashganligi oqibatida kristall ichida davriy elektr maydon shakllangan bo'ladi. Kristallning davriy ichki elektr maydonining har qanday buzilishi nuqson bo'ladi. Nuqsonlar misoli tariqasida yot atom – kirishmaning kristall atomi o'rniga joylashib olishi va kristall atomining joyidan ketishi – vakansiya (bo'sh joy) hosil bo'lishini keltirish mumkin.

Agar kristalldagi nuqsonlar oz bo'lsa, bu holda ular bir-biridan ancha yiroqda joylashgan, ya'ni kristall panjarasi nuqsonlari mahalliylik bo'ladi. Bunda kristall ichidagi elektr maydon faqat nuqson atrofida

buziladi, boshqacha aytganda, kristallning davriy V_0 potensialiga nuqson yaqinida V' qo'shimcha potensial qo'shiladi. to'la potensial $V = V_0 + V'$ bo'ladi. Shuning uchun ham faqat shu sohada bo'lgan elektronlarning energetik holatlari o'zgaradi. bu esa idel qattiq jism elektronlari energiya zonalariga qo'shimcha mahalliy energetik holatlarning paydo bo'lishiga olib keladi. Bunday mahalliy holatlar soni nuqsonlar soniga teng, yoki agar bir nuqson bir necha holatda bo'la olsa, mahalliy holatlar soni N nuqsonlar sonidan katta bo'ladi.

Mahalliy energetik sathlarda elektronlar bog'langan, bu bog'lanish turli qattiq jismlarda mohiyatan turlichadir. Metallarda elektronlardan bo'sh nuqsonlarning ionlangan holatda bo'lishligi eng ehtimolligidir. Yarimo'tkazgichlar va dielektirkklar elektronlari taqiqlangan energiyalari zonasi bo'lgan energetik spektrga egadir. Albatta, bunday kristallarda mahalliy energetik holatlar ruxsatlangan zonalariga tushishi mumkin. Agar ular o'tkazuvchanlik zonasida joylashsa, ularni **rezonans sathlar**, agar ular valent zonasida joylashsa, ularni **antirezons sathlar** deyiladi. Bu hollarda nuqsonlarga tegishli elektronlar ular bilan bog'lanishini yo'qotadi va umumlashgan zona elektronlari jamoasiga qo'shiladi. Lekin, aksariy ko'p hollarda nuqsonlar sathlarida joylashgan elektronlar nuqsonlarga bog'liqligicha qolishi mumkin, ularni faqat issiqlik harakati yoki boshqa energiya manbai hisobiga o'z nuqsonlaridan ajratib yuborish — aktivlantirish mumkin. Nuqsonlarga bog'liq elektronlar elektr o'tkazuvchanlikda qatnasha olmaydi. albatta. Bunday nuqsonlarning elektronlar uchun sathlari yarim o'tkazgichning taqiqlangan zonasida joylashgan bo'ladi. Bu 2.7-rasmda ko'rsatilgan. Qaysi bir manbadan olingan energiya evaziga nuqsonlar ionlanadi? Bir xillari o'tkazuvchanlik zonasiga elektronlar berib, o'zlari musbat zaryadli nuqsonlarga (2.7-a rasm), boshqa xillari. aksincha, elektronlarni tutib olib, manfiy zaryadli nuqsonlarga (2.7-b rasm) aylanadi.



2.7-rasm. Energiya zonalari.

O'tkazuvchanlik zonasiga elektronlar bera oladigan nuqsonlarni donorlar deyiladi. tarkibida donorlar bo'lgan yarimo'tkazgichlarni esa elektron o'tkazuvchanlikli yarimo'tkazgichlar yoki n -tur yarimo'tkazgichalar deyiladi. Mos ravishda yarimo'tkazgichlarning o'tkazuvchanlik zonasidagi elektronlar ko'chishi bilan bog'liq elektr o'tkazuvchanlikni elektron elektr o'tkazuvchanlik yoki n -tur o'tkazuvchanlik deyiladi.

Agar kristallni qizdirganda elektronlar valent zonadan nuqsonlar sathlariga o'ta olsa, bu holda valent zonada harakatchan musbat zaryadli kovaklar paydo bo'ladi. kovak elektr o'tkazuvchanlik vujudga keladi. Elektronlarni o'ziga qabul qiladigan nuqsonlarni akseptorlar deb atalgan, tarkibida akseptorlar bo'lgan yarimo'tkazgichni esa yoki kovak o'tkazuvchanlikli yarimo'tkazgich yoki p -tur yarimo'tkazgich deyiladi.

2.7-rasmda donorlar sathlari o'tkazuvchanlik zonasi tubi yaqinida, akseptorlar sathlari esa — valent zona shipi yaqinida tasvirlangan. Xususi ionlanishga nisbatan nuqsonlar ionlanishi ancha oson, kichikroq temperaturalarda yuz beradi. Sathlarning donor yoki akseptor bo'lishligi mazkur sathlarni hosil qiluvchi nuqsonlarning tabiatiga bog'liq.

Donorlar elektronlarni faqat o'tkazuvchanlik zonasiga emas, balki akseptor tabiatli har qanday nuqsonga bera oladi. Akseptorlar elektronlarni valent zonadan qabul qilish bilan bir vaqtda kristalldagi har qanday donordan ham olishi mumkin.

Nihoyat, amforterlik xossalari namoyon bo'ladigan, yani donor ham, akseptor ham bo'la oladigan tabiatli nuqsonlar mavjud. Nuqsonlarni sinflarga ajratish kristall maydonining nuqson tomonidan buzilishi o'lchamlariga asoslangan:

- nuqtaviy (nol o'lchovli) nuqsonlar, ularga o'lchamlar $x \langle a, y \langle a, z \langle a$ bo'lgan nuqsonlar mansub, bunda a — kristall panjarasi doimiysi;

- chizig'iy (bir o'lchovli) nuqsonlar, ikki yo'nalishda ularning o'lchamlari kichik ($< a$) va uchinchi yo'nalishda o'lchami har qancha bo'lishi ($>> a$) mumkin;

- yassi (ikki o'lchamli) nuqsonlar, ularning bir yo'nalishda o'lchami kichik, xolos.

- hajmiy (uch o'lchovli) nuqsonlar, ularning ba'zilar makronuqsonlarga ta'luqli bo'ladi.

Bu o'lchamlar bo'yicha sinflashga bir necha bir xil yoki har xil sodda nuqsonlarning birlashmasidan iborat murakkab nuqsonlarni ham kiritish mumkin.

U yoki bu nuqson paydo bo'lishida o'rinli bo'ladigan tartibsizlanish

avzoyiga qarab ham nuqsonlarni boshqacha sinflarga ajratiladi. Avvalo ular xususiy tartibsizlanish nuqsonlari bo'lib, ularning eng muhim misollari elektron va atomga oid nuqsonlardir. Ular qattiq jismlardagi diffuziya, eritmalar parchalanishi va boshqa hodisalar ishtirokchilaridir.

Bu sinfga harakat nuqsonlari. yo'nalganlik nuqsonlari. eksitonlar (elektron — kovak juftlar), fononlar va polyaronlar mansubdir.

Kirishma atomlar mavjud bo'lishiga bog'liq bo'lgan tartibsizlanish nuqsonlari boshqa sinfni tashkil qiladi.

Nuqtaviy nuqsonlarga kristall panjaraning bo'sh tugunlari va tugunlararo atomlar, kristalga kirib qolgan begona atomlar, rangdorlik markazlari. shuningdek, bu nuqsonlarning birikmalari kiradi.

Nuqtaviy nuqsonlar — tuzilish nuqsonlari ichida eng keng tarqalgani hisoblanib, qizish (issiqlik nuqsonlari), tez zarrachalar bilan nurlanish (radiatsion nuqsonlar), kimyoviy birikmalar tarkibida stexiometriyadan og'ishlar (stexiometrik nuqsonlar), kiritilgan yoki nazoratga olib bo'lmaydigan kirishmalar borligi tufayli vujudga keladi.

Chizig'iy nuqsonlar dislokatsiyalardir. Yassi nusonlarga kristalning donachalari va egizaklari chegarasi. taxlanish nuqsonlari. fazalar aro chegaralar va kristall chegaralari kiradi. Xajmiy nuqsonlarga boshqa faza qirindilari va mikrobo'shliqlar kiradi. Ular, odatda, kristall o'stiralayotgan suyilmada katta miqdorda kirishmalar, iflosliklar mavjudligidan yoki o'ta to'yingan qattiq eritmaning keyingi parchalanishidan hosil bo'ladi.

Ikki o'lchamli nuqsonlar shuningdek, suyilmada kirishmalar mavjudligi natijasida ham hosil bo'lishi mumkin. Ammo, ko'pincha ular kristall o'sishi rejimi xossalari tufayli hosil bo'ladi.

Chizig'iy nuqsonlar — dislokatsiyalarning paydo bo'lish sababi bo'lib, o'sish jarayonida kristalda hosil bo'luvchi yoki keyingi texnologik jarayonlarda yuzaga keluvchi nuqsonlar hisoblanadi.

2.5. Nuqsonlar turlari

Haqiqiy kristallarda ideallashtirilgan modeldan, avvalambor, qattiq jismining kristall panjarasida atomlarning davriy joylashuvida ko'pgina buzilishlar bilan farq qiladi. Bu buzilishlarni tuzilish nuqsonlarining geometrik belgilari bo'yicha 4 ta sinfga bo'lish mumkin:

- 1) nuqtaviy (nol o'lchamli),
- 2) chizig'iy (bir o'lchamli),
- 3) yassi (ikki o'lchamli),
- 4) hajmiy (uch o'lchamli) nuqsonlar.

Nuqtaviy nuqsonlarga kristall panjaraning bo'sh tugunlari va tugunlararo atomlar, kristallga kirib qolgan begona atomlar, rangdorlik markazlari. Shuningdek, bu nuqsonlarning birikmalari kiradi.

Chizig'iy nuqsonlar dislokatsiyalardir. Yassi nuqsonlarga kristallning doimchalari va egizaklari chegarasi, taxlanish nuqsonlari, fazalararo chegaralar va kristall chegaralari kiradi. Hajmiy nuqsonlarga boshqa faza turndilari va mikrobo'shliqlar kiradi. Ular, odatda, kristall o'stirilayotgan suyuqlamada katta miqdorda kirishmalar, iflosliklar mavjudligidan yoki o'ta to'yingan qattiq eritmaning keyingi parchalanishidan hosil bo'ladi.

Ikki o'lchamli nuqsonlar shuningdek, suyuqlamada kirishmalar mavjudligi natijasida ham hosil bo'lishi mumkin. Ammo, ko'pincha ular kristall o'sishi rejimi xossalari tufayli hosil bo'ladi.

Chizig'iy nuqsonlar — dislokatsiyalarning paydo bo'lish sababi bo'lib o'zgarish jarayonida kristallda hosil bo'luvchi yoki keyingi texnologik jarayonlarda yuzaga keluvchi nuqsonlar hisoblanadi.

Nuqtaviy nuqsonlar — tuzilish nuqsonlari ichida eng keng tarqalgani hisoblanib, qizish (issiqlik nuqsonlari), tez zarrachalar bilan nurlanish (radiatsion nuqsonlar), kimyoviy birikmalar tarkibida stexiometriyadan og'ishlar (stexiometrik nuqsonlar), kiritilgan yoki nazoratga olib bo'lmaydigan kirishmalar borligi tufayli vujudga keladi.

2.6. Termodinamik muvozanatdagi nuqtaviy nuqsonlar

Kristallni nurlash, unga kirishmalarni kiritish, deformatsiyalar va h.k.lar bilan bog'liq ravishda paydo bo'luvchi. boshqa nuqtaviy nuqsonlardan farqli ravishda, kristallarda spontan (o'z-o'zidan) ravishda nuksonlarning termodinamik muvozanat holatlarida katta miqdorda qattiq jismning tabiiy kristallik holatida yuzaga kelishi mumkin. Shuning uchun ular doimo har qanday kristallarda mavjuddir. Kristallarda issiqlik nuqsonlarining hosil bo'lish mexanizmi Ya.i.Frenkel tomonidan o'rganib chiqilgan. U bayon etgan ma'lumotlar quyida keltirilgan bo'lib, yetarli darajada sodda va ko'rgazmalidir. Fizikada sublimatsiya-qattiq jismlarning bug'lanish hodisasi yaxshi ma'lum. Qattiq jism ustida, xuddi suyuqlikdagidek, shu modda atomlaridan tuzilgan «bug'» hamisha mavjud. Agar qattiq jism og'zi berk idishga joylashtirilsa, qattiq jism yuzasidan bug'lanuvchi bug' bosimi temperatura ortishi bilan oshib borishiga oson iqror bo'lish mumkin.

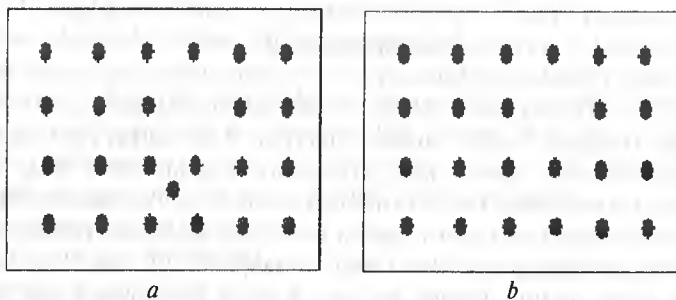
Bu hodisani izohlash uchun, qattiq jism yuza qatlamini tashkil etuvchi ba'zi atomlar, qizitish jarayonida kristall yuzasidan uzilib, uni o'rab turuvchi bo'shliqqa o'tish uchun yetarli bo'lgan kinetik energiyaga ega bo'lishi mumkin. Bu sublimatsiya hodisasidir. Ammo, bunday uzilishlar faqat yuza

atomlari uchun emas, balki kristall ichidagi atomlar uchun ham o'rinli bo'lishi mumkin. Darhaqiqat, statistik fizikaning asosiy qonunlaridan biri, energiya bo'yicha zarrachalar taqsimlanishining Maksvell qonuniga asosan, atomlarning o'rtacha kinetik energiyasi juda kam bo'lgan holatda ham, kristalda kinetik energiyasi juda yuqori bo'lgan ma'lum miqdordagi atomlar bo'ladi. Bu holatda, ushbu hodisaning ehtimollik xarakteriga xos ravishda kristallning har qanday atomi ertami-kechmi o'rtacha kinetik energiyadan ancha ko'p bo'lgan energiyaga ega bo'lishi mumkin. Bunday atom kristaldagi o'zining muvozanat holatidan chiqib ketishi mumkin va o'zini o'rab turuvchi qo'shni atomlardan hosil bo'lgan potensial to'siqni yengib, qandaydir yangi muvozanat holatiga o'tishi mumkin. Bunda u kristall bo'ylab harakatlanib, o'zining ortiqcha energiyasini qaytib panjaraga (kristallning boshqa atomlariga) berish yo'li bilan yo'qotadi. Kristall ichida «bug'langan» atom qayerga ketishi mumkin? Agar panjaraning barcha yaqin tugunlari band bo'lsa u tugunlar orasiga joylashishi mumkin.

Kristall ichida atomlarning «bug'lanishi» bir vaqtning o'zida bo'sh, to'lmagan tugunlar — vakansiyalar hosil bo'lishiga olib keladi.

Kristallardagi tugunlar orasidagi atomlar va vakansiyalar juftlaridan iborat nuqsonlarni Frenkel nuqsonlari deb ataladi. (2-a rasm)

Frenkel nuqsonlaridan tashqari kristallarda yolg'iz nuqtaviy nuqsonlar— vakansiyalar ham uchraydi. ularni birinchi marta Shottki ko'rib chiqqanligi uchun, uning nomi bilan ataladi. Shottki nuqsonlari kristallarda atomlarning zich joylashishi holatida o'rinlidir, bunda atomlarning tugunlar orasida joylanishi qiyin va energetik muvozanat nuqtayi nazardan ma'qul emas. Bunday holda kristalda nuqsonning hosil bo'lish jarayoni quyidagicha kechishi mumkin. Kristallarda sirtiy qatlarni hosil qiluvchi alohida atomlar bir qismi issiqlik harakati natijasida qo'shni atomlardan uzilib, «yanada yuzaroq» holatga o'tishi mumkin (2-b rasm).



2.8-rasm. Kristallardagi nuqsonlar: a) Frenkel, b) Shottki nuqsonlari.

Bu harakatga nisbatdan kam energiya sarf qilinishi bois atomlarning qisman dissotsiatsiya ehtimolligi kristall yuzasidan to'liq uzilish ehtimolligidan yuqoriligi o'z-o'zidan ko'rinib turibdi.

Qisman bug'lanish vaqtida kristall yuzasida ham vakansiyalar hosil bo'ladi. Dastlab bu vakansiyalar to'liq shakllanmagan, chunki ular ustida atomlar yo'q. Keyinchalik ular kristall hajmiga ko'chib u yerda oddiy vakansiyalarga aylanadi. Shunday qilib, Frenkel nuqsonlaridan farqli o'laroq shottki nuqsonlari kristallning muntazam panjarasidagi bo'sh tugunlari sifatida namoyon bo'ladilar.

Frenkel nuqsonlari va Shottki nuqsonlari faqat qizdirilganda emas, balki kristallarni nurlantirilganda, plastik deformatsiyalar va boshqa bir qator ta'sirlar oqibatida ham paydo bo'lishi mumkin, ammo ularning zichliklari termodinamik muvozanatli emas (temperaturaga bog'liq emas). Shu bilan bir vaqtda kristallarda issiqlik nuqsonlari zichligi doimo temperaturaga bog'liq bo'lib, temperatura ortishi bilan ortib boradi va pasayganda kamayadi.

2.7. Radiatsion nuqtaviy nuqsonlar

Radiatsion nuqtaviy nuqsonlar kristallarni tez yadroviy zarrachalar-neutronlar, deutronlar, α -zarrachalar, yadrolar bo'linishida chiqqan zarrachalar va tez elektronlar bilan nurlanganda yuzaga keladi. Kristallarni γ -kvantlar bilan nurlashda yuzaga keluvchi foto va kompton elektronlar ham tarkibiy nuqsonlar hosil bo'lishiga olib kelishi mumkin.

Radiatsion nuqtaviy nuqsonlar kristallarda doim juft holda-vakansiya va tugunlararo atom (Frenkel nuqsonlari) holida uchraydi. Yuqorida aytib o'tilganidek, radiatsion nuqtaviy nuqsonlar issiqlik nuqsonlaridan farqli ravishda termodinamik muvozanatli emas, nur bilan ta'sir etish to'xtaganidan so'ng kristall holati barqaror emas.

Kristallni neytral va zaryadlangan tez zarrachalar bilan nurlantirishda radiatsion nuqsonlar hosil bo'lish mexanizmini ko'rib chiqamiz. Tez zarrachalarning kristallar orqali o'tishi murakkab jarayonlar bilan kechadi. jumladan, ular orasida muhimlari:

1) tez zarrachalarning kristall atomlari yadrolari bilan elastik to'qnashuvlari;

2) qo'zg'alish va ionizatsiya — tez zarrachalar yordamida kristall atomlarining elektron qobiqlarida joylashgan elektronlarning yuqori holatlarga o'tishi va ionlanishi;

3) yadroviy ayrilishlar — kristall atomlarining ba'zi qismlarini faollashuvi (ularning radioaktiv holatga o'tishi), keyin shar radioaktiv

parchalanishdan kirishmaviy markazlarga aylanadi.

Umumiy holatda bir vaqtning o'zida barcha 3 ta jarayon kechadi. Ammo, atomlarning kristall panjaradagi bog'lanish xarakteri va nurlantirilayotgan kristallning boshqa xossalari, shuningdek tez zarrachalarning tabiati va ularning energiyasiga bog'liq bo'lgan ayrim hollarda bir jarayon ikkinchisidan ustun bo'lishi mumkin. Masalan, elektronlarni yuqori holatlarga o'tish va valent elektronlarning ajralib ketishi jarayonlari dielektrik yoki yarimo'tkazgich kristalllarda katta rol o'ynaydi. metallarda bu jaraen deyarli sezilmaydi. Boshqa tomondan, metallarda tez zarrachalarning erkin elektronlar bilan o'zaro ta'siri ustivordir. U metallarda elektronlarning erkin yugurish yo'lini kamayishiga olib keladi.

Biz ko'rib chiqayotgan nuqtaviy radiatsion nuqsonlar hosil bo'lish jarayoni uchun tez zarrachalarning kristall atomlari bilan elastik to'qnashuvlari ko'proq ahamiyatlidir. Bu to'qnashuvlar quyidagi effektlarga olib keladi:

1) kristallda elastik to'lqinlar hosil bo'ladi. ularning energiyasi atomlarning issiqlik harakati energiyasiga o'tadi;

2) tarkibiy buzilishlari hosil bo'ladi.

Buning uchun panjara tugunlarida joylashgan atomlar, harakat qilayotgan zarrachadan kristallda nuqson hosil bo'lish energiyasining chegaraviy qiymati U_d yuqori bo'lgan energiyani olishi kerak. Tadqiqotlar ko'satishicha, U_d atomning panjaradagi normal holatidan tugunlar oralig'iga adiabatik o'tishiga yetarli bo'lgan energiyadan 2 — 3 marta yuqori bo'lishi kerak. Chunki bu holatda nuqson hosil bo'lish energiyasi $U_d = U_a + U_m + U_{or} + U_{muvozc}$, dan iborat bo'ladi. Bunda U_a — atomni adiabatik o'tish energiyasi. U_m — atomni o'z joyidan siljib ketish (migratsiya) energiyasi. U_{or} — kristall panjarada vakansiyani qayta muvofiqlashish energiyasi. U_{muvozc} — siljigan atomni kristall panjarani biror joyida muvozanat holatiga o'tish energiyasi. Ko'pgina kristallar uchun kristall panjaradagi atomlar bog'lanish energiyasi taxminan 10 eV (-231 kkal/mol) bo'ladi. $U_d \approx 25$ eV (-580 kkal/mol) ga teng. Tez zarrachadan $U \geq U_d$ energiyani olgan kristallning har bir atomi tugunlar oralig'iga siljishi mumkin, buning natijasida bir vaqtning o'zida bo'sh tugun va tugunlar oralig'ida atomlar vujudga keladi. Bunda, agar siljigan atomlar energiyasi kattaligi (ularni berish atomlari deb atash qabul qilingan) U_d dan ancha ko'p bo'lsa, unda bu birlamchi atomlar o'z navbatida ikkilamchi berish atomlarini. ikkilamchilari-uchlamchi atomlarni va hakoza paydo qilishi mumkin, bu jarayon siljigan atomlar energiyasi chegaraviy atomlar U_d qiymatga yaqinlashmaguncha davom etadi.

Kristallarda tez zarrlarning elastik sochilishi. panjarada tuzilish nuqsonlarining paydo bo'lishiga olib keladi. Tabiiyki. bu jarayon zarrachalar energiyasiga bog'liq bo'lib, uning ortishi bilan sochilish kamayib boradi. Harakatlanuvchi zarrachalarning kinetik energiyasini hisoblashda qulaylik uchun quyidagi energetik parametr qabul qilingan:

$$\varepsilon = \frac{m}{M_1} E, \quad (2.1)$$

bu yerda: M_1 — harakatlanayotgan zarracha massasi, m — elektron massasi, E — uning kinetik energiyasi.

Shunday qilib, ε parametr tezligi og'ir zarrachacha ega bo'lgan tezlikka teng bo'lgan elektron energiyasidir. E parametr yetarli darajada katta bo'lgan hollarda, harakatlanayotgan zarracha energiyasining katta qismi atomlarning ionlanishi uchun sarf bo'ladi va ozgina qismi-elastik to'qnashuvlarga sarf bo'ladi. Ammo bu ε parametrdan ancha katta bo'lgan holatlarda to'g'ri. ε , nemetall dielektrik va yarimo'tkazgich kristallardagi elektronlarning qo'zg'alish energiyasi. Ammo ε parametr ε_i ga nisbatan kichik bo'lgan hollarda ionlanishi va o'z o'rnidan siljishi to'xtaydi. bunda faqat elastik atomlarni va radiatsion to'liqlarni yuzaga keltiruvchi elastik to'qnashuvlar o'rin egallaydi.

Elastik to'qnashuvlarda tez zarrachalarning tarkibiy nuqsonlarini hosil qilishi va panjaraning issiqlik tebranishlari xosil qiladigan to'liqlar vujudga kelishi shu zarrachalar energiyasi va kristallning fizik-kimyoviy xossalariga ham bog'liq. Kristalda elastik to'qnashuvlarda harakatlanuvchi zarrachaga energiyasining yo'l birligida to'liq yo'qolishi quyidagicha ko'rinishga ega:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{elas} = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4 N_0}{M_2 v^2} \ln \frac{E}{E^*}. \quad (2.2)$$

Bu yerda: Z_1 va Z_2 — harakatlanuvchi va tinch turgan zarrachalarning atom nomeri, N_0 — kristall xususiy atomlari zichligi, v — harakatlanuvchi zarracha tezligi, E — uning energiyasi, e — elektron zaryadi, M_2 — tinch turgan zarracha massasi.

$$E^* = 0,618 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right) \frac{2mM_1}{4\mu^2} R, \quad (2.3)$$

bu yerda R — Ridberg doimiysi 13,54 eV ga teng, μ — harakatlanuvchi va harakatsiz zarrachaning keltirilgan massasi. Bu vaqtda, tez zarrachaning kristall atomlari bilan elastik to'qnashuvlarda nuqsonlar hosil bo'lishiga yo'l birligida sarflagan energiyasi quyidagicha ifodalanadi:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{mk} = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4 N_0}{M_2 g^2} \ln \frac{E 4\mu^2}{U_d M_1 M_2} \quad (2.4)$$

U holda

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{mk} / \left(\frac{dE}{dx}\right)_{el} = \ln \left(\frac{E}{U_d} \frac{4\mu^2}{M_1 M_2} \right) / \ln \frac{E}{E^*} \quad (2.5)$$

nisbat harakatlanuvchi zarrachaning nurlantirilayotgan kristall atomlari bilan to'qnashganda tuzilish nuqsonlari hosil bo'lishiga sarf bo'lgan energiyasi bo'lagini ifodalaydi. Ko'p hollarda bu nisbat taxminan 0,5 ga teng.

Yuqorida aytib o'tilganidek, tez zarrachalarning radiatsion nuqson hosil bo'lishi uchun zarur bo'lgan energiyasining chegaraviy qiymati. kristallning fizik-kimyoviy xossalari. kristallning xususiy atomlari atom og'irliklari bilan belgilanadi.

2.3-jadvalda turli atom og'irliklariga ega atomlardan tuzilgan kristallardagi turli zarrachalarning radiatsion nuqsonlarni hosil qilish uchun zarur chegaraviy energiya miqdorlari keltirilgan.

E energiyali va M_1 massali birgina siljigan atom urilib siljitgan atomlari soni N ni baholash uchun quyidagi taqribiy ifodadan foydalanish mumkin;

$$N = \frac{1}{U_d} \frac{M_1}{m} \varepsilon t \left[\ln \left(\frac{E}{U_d} \frac{4\mu^2}{M_1 M_2} \right) \right]^{1/2} \ln \frac{E}{E^*} \quad (2.6)$$

Bu yerda: ε , — valent elektronlar qo'zg'otish energiyasining chegaraviy qiymati.

2.3-jadval.

Zarrachalar	Atom og'irligi			
	10	50	100	200
Neytronlar, protonlar, (eV)	75	325	638	1263
Elektronlar, γ -nurlari. (MeV)	0,10	0,41	0,68	1,10
α -zarrachalar, (eV)	31	91	169	325
Yadro bo'linish qoldiqlari. (eV)	85	30	25	27

Kristallarda radiatsion nuqsonlar nurlantirishdan tashqari lokal isitish yoki suyultirish hosil qilishi natijasida ham yuzaga kelishi mumkinligini aytib o'tish lozim. Lokal suyultirish joylarida $10^3 - 10^4$ atomlardan iborat nuqsonlar to'plami yuzaga keladi. Lokal suyultirishda va keyingi sovutishda, nuqtaviy nuqsonlardan tashqari, chizig'iy, yassi yoki hajmiy nuqsonlar —

dislokatsiyalar, donadorlik chegarasi mikrobo'shliq yoki mikroyoriq ko'rinishidagi nuksonlar yuzaga kelishi mumkin.

2.8. Stexiometrik nuqsonlar

Ikki va undan ortiq atomlardan tashkil topgan birikmalar va murakkab kristallarda birorta tashkillovchining ortib ketishi yoki kamayishi kristallarni o'zgartirish va ularni keyingi termik ishlovlarda stexiometrik nuqsonlar yuzaga kelishi mumkin. Nuqsonli tuzilishga ega kimyoviy birikmalardan tashkil topgan kristallarning kattagina sinfi mavjud, ularda kristall panjara tugunlarining bir qismi (~ 30% gacha) atomlar bilan band emas.

Dielektrik va yarimo'tkazgich kristallardagi rangdorlik markazlari ham stexiometrik nuqsonlarga kiradi (2.9-rasm). Bunday nuqsonlar, odatda, ion bog'lanishli ikki elementdan tashkillangan binar birikma kristallarida paydo bo'ladi. Masalan, ishqoriy-galoidli kristallarning ishqoriy kristall bug'larida qizishi spektrda o'ziga xos yorug'lik yutish oralig'i paydo qiladi. uning maksimumi spektrning ko'rinadigan qismiga to'g'ri keladi. Bunday kristallar rangli ko'rinadi. (NaCl — sariq rangda, KCl — ko'k rangda va hikazo). Bunday kristallarni kimyoviy tahlilining ko'rsatishicha, ular tarkibida hamisha ishqoriy metall atomlarining ortiqcha miqdoriga ega bo'ladilar. Ba'zi ishqoriy-galoid kristallar ularni galoidlarining atmosferasida qizdirilganda ham o'ziga xos ranglarga ega bo'ladi.

Na ⁺	Cl ⁻	Na ⁺	Cl ⁻
Cl ⁻	Na ⁺	e	Na ⁺
Na ⁺	Cl ⁻	Na ⁺	Cl ⁻
Cl ⁻	Na ⁺	Cl ⁻	Na ⁺
Na ⁺	Cl ⁻	Na ⁺	Cl ⁻

2.9-rasm. NaCl da rangdorlik markazi modeli.

Hozirgi vaqtda ayta olamizki ishqoriy-galoid kristallarning rangdorligi kristall elektronlarining energetik spektrlarida elektronlar (yoki galoidlar atmosferasida qizdirishda — kovaklar) bilan to'ldirilgan lokal holatlar paydo bo'lishiga bog'liq. Bunday holatlar ishqoriy-galoid birikmalar tarkibida qaysi bir tarkibiy qismning ortiqchiligi hisobiga stexiometrik tarkibdan og'ishiga asoslanadi. Bunday vaqtda ionli kristallarda, odatda, vakant tugunli

tuzilishlar hosil bo'ladi. bu esa tugunlar oralig'ida ortiqcha ionlar hosil bo'lgan tuzilishlarga nisbatan energetik jihatdan qulayroq.

Demak, ishqoriy metall bug'larida ishqoriy-galoid kristallarni qizdirishda hosil bo'luvchi rangdorlik markazi modelini galoidning vakant tuguni bilan ushlab qolingan lokal elektron sifatida tasavvur qilish mumkin. Xuddi shuningdek, ishqoriy-galoid kristallarni ishqoriy metall bug'larida qizdirish vaqtida hosil bo'luvchi rangdorlik markazini ishqoriy metall vakant tuguni ushlab qolgan kovak sifatida izohlash mumkin. Anion vakansiyalar tufayli yuzaga keluvchi rangdorlik markazini V_c^- bilan, kation vakansiya tufayli yuzaga keluvchi rangdorlik markazini V_c^+ bilan belgilaymiz. Rangdorlik markazlariga ega kristallar holatlari energetik sxemasi kirishmali yarimo'tkazgichlardagi elektronlar holatining energetik sxemasiga o'xshash (yoki xuddi o'zi).

Rangdorlik markazi turidagi tuzilish nuqsonlari ionli bog'lanish xarakteriga ega binar yarimo'tkazgich birikmalar kristallarida ham mavjud bo'ladi. Masalan, ZnO kristallari vakuumda qizdirilganda, kislorod yo'qotayotgan holatda, sariq rangga kiradi. Ammo, ko'pchilik yarimo'tkazgich kristallarda yorug'likni yutish oralig'i maksimumi odatda, spektrning ko'rinmas infraqizil qismida yotadi. Bunday kristallarda rangdorlik markazlarining mavjudligi ular rangining sezilmas o'zgarishi bilan faqat elektrik xossalari o'zgarishiga olib keladi. Bunday yarimo'tkazgich kristallarda rangdorlik markazlarining mavjudligi ularning rangi sezilmas darajada o'zgargani holda faqat elektrik xossalari o'zgarishiga olib keladi. Bunday yarimo'tkazgich kristall sifatida PbS ni ko'rib chiqamiz. Ma'lumki, PbS kristallarini oltingugurt bug'larida qizdirish kovak o'tkazuvchanlikni oshiradi. Bunda kovaklar zichligi S bug'lari bosimi ortishi bilan oshib boradi. Agar qizdirishni yetarli sathdagi S bug'larining past bosimida yoki vakuumda bajarilsa, kristallar o'tkazuvchanligi elektron xarakterga ega bo'ladi. elektronlar zichligi esa S bug'lari bosimi pasayishi bilan ortib boradi. PbS ning elektrik xossalari termik ishlovning bunday ta'sirini bu moddada rangdorlik markazlari paydo bo'lishi bilan bog'lash mumkin. Darhaqiqat, PbS ni oltingugurt bug'larida qizdirish kation vakansiyalar hosil bo'lishiga, vakuumda esa — anion vakansiyalar hosil bo'lishiga olib keladi. Kation va anion vakansiyalarda kovak va elektronlarning joylashuvi V_c^+ va V_c^- markazlarining hosil bo'lishiga olib keladi.

Tajribalar ko'rsatishicha PbS da har bir V_c^+ markaz faqat bir kovakka, V_c^- markaz esa faqat bir elektronga ega, PbS ikki marta zaryadlangan Pb^{2+} va S^{2-} vaionlardan iborat ekanligiga qaramasdan, tarkibiy atomning valentligi va rangdorlik markaz zaryadlari o'rtasidagi bunday nomutanosiblik

ionlarning vakansiya yaqinida joylashish xarakteriga bog'liq.

Buni V_c^+ turdagi rangdorlik markazlari hosil bo'lish misolida ko'rib chiqamiz. Kation vakansiyaning hosil bo'lishi (Pb^{2+} ionining ketishi) panjaraning neytralligini buzilishi degani emas. Uning buzilishi quyidagi yo'llar bilan yuzaga kelishi mumkin.

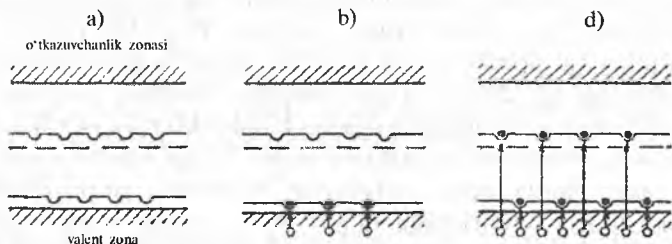
1. Kation vakansiya yaqinida oltingugurtning neytral atomi hosil bo'ladi. Bunda vakansiyaning effektiv zaryadi nolga teng. Bunday holatni $[Pb]S$ ko'rinishida belgilaymiz.

2. Kation vakansiya yaqinida S^- ionining paydo bo'ladi. Bunda vakansiyaning effektiv zaryadi +1 ga teng. Bunday holatni $[Pb^+]S$ bilan belgilaymiz.

3. Kation vakansiya yaqinida S^{2-} ionining hosil bo'ladi. Bunda vakansiya effektiv zaryadi +2 ga teng. Buni $[Pb^{2+}]S^{2-}$ ko'rinishida belgilaymiz.

Bu yerda mumkin bo'lgan holat 4-rasmda sxematik tarzda tasvirlangan. Birinchi holat man qilingan zonada ikki erkin sath mavjudligi (2.9-rasm, a) faqat juda past temperaturada o'rinalidir. Undan yuqoriroq bir maromdagi temperaturalar uchun ikkinchi holat amalga oshadi. Pastki sath elektronlar bilan to'ldiriladi va valent zonada kovaklar hosil bo'ladi (har bir pastki akseptor sathga bittadan kovak (2.9-b rasmga qarang)). Ikkinchi sath to'ldirilishi valent zonada ikkita kovak hosil bo'lishi bilan faqat yuqori temperaturalarda amalga oshiriladi. Lekin, bunday temperaturalarda elektronlarning valent zonadan o'tkazuvchanlik zonasiga o'tishi ortadi. Bu holda ehtimoli bor bo'lgan uchinchi holat sezilmay qoladi (2.10-rasm, c). Bu bilan, ehtimol, tajribada kuzatilgan har bir kation vakansiyaga PbS da bittadan harakatchan kovak yuzaga kelishi tushuntirilishi mumkin.

Xuddi shunday holat V_c^- turidagi rangdorlik markazlari hosil bo'lishi uchun ham o'rinalidir. Bunda har bir V_c^- markaz bittadan elektron manbai bo'ladi.



2.10-rasm. Rangdorlik markazining mumkin bo'lgan energetik holati. (PbS ga V_c^+)

Oksidlardan tashkil topgan kristallarda rangdorlik markazlari kristallarni vakuumda qizdirganda paydo bo'ladi. Kislorodning bir qismi bug'lanishi va kislorod atomlarining vakant tugunlarining yuzaga kelishi TiO_2 ni och ko'k rangga, ZnO ni sariq rangga kirishiga sabab bo'ladi. Oksidni kislorod atmosferasida qizdirish metal panjarasida vakant tugunlar hosil bo'lishiga olib kelishi mumkin, ular ham o'z navbatida rangdorlik markazlarini hosil qiladi. Masalan, mis oksidini kislorod atmosferasida qizdirishda o'ziga xos yorug'likni yutish oralig'i $0,6 \text{ eV}$ ($\sim 2 \text{ mk}$) zonasida eng yuqori bo'ladi.

Kristallarda rangdorlik markazlari zichligi $10^{19} \div 10^{21} \text{ sm}^{-3}$ ga, ba'zi kristallarda (CaF , TiO_2 , ZnO va boshqalarda) — hatto 10^{22} sm^{-3} ga yetishi mumkin. Tajriba sharoitida rangdorlik markazlari hosil bo'lishi kristallar zichligining kamayishiga olib kelishi isbotlangan. Bu hodisa qo'shimcha tarzda bu markazlar kristallarda vakansiyalarning hosil bo'lishi bilan bog'liqligini. ammo, tugunlar oralig'ida atomlar paydo bo'lishiga bog'liq emasligini ko'rsatadi.

2.9. Yarimo'tkazgichlarda kirishmalar

Begona elementlar atomlari kirishmalari — kristallardagi tuzilish nuqsonlari sifatida ko'rilishi lozim. Begona atomlar kristall panjaraning muntazam tugunlarda joylashishi va o'rinbosar qattiq eritmalar hosil qilishi mumkin yoki suqilma qattiq eritmalar hosil qilib, tugunlar oralig'ida joylashishi ham mumkin. Bundan tashqari. ular o'zaro yoki boshqa tuzilish nuqsonlari bilan birikib turli xil komplekslar hosil qilishi mumkin. O'rinbosar qattiq eritmalar hosil bo'lishining zaruriy sharti bo'lib erituvchi va eritilgan modda (asosiy va kirishma) atomlari radiuslarining yaqinligi xizmat qiladi. Erituvchi va erigan moddalarning atom radiuslari 14% dan ko'proq farq qilganda o'rinbosar qattiq eritma hosil bo'lish ehtimoli cheklangan bo'lishi isbotlangan. Va aksincha, atom radiuslari 14% dan kamroq farq qilganda o'rinbosar qattiq eritmalar kiritilgan yot tabiatli atomlar zichliklarining keng oralig'ida mavjud bo'lishlari mumkin. Biroq, o'rinbosar qattiq eritmalar hosil bo'lishi uchun faqatgina yaxshi geometrik omilning o'zi kifoya emas: erigan element va erituvchining kristall tuzilishlarining va atomlar tashqi elektron qobig'ining o'xshashligi ham katta ahamiyatga ega. Sanab o'tilgan barcha omillarning mujassamligi bir moddaning boshqasida chegaralanmagan miqdorda erishi mumkin bo'lgan hollarda qattiq eritmalarning uzluksiz qatori yuzaga kelishiga olib keladi. Tabiiyki. agar bunda qattiq eritma tartibli bo'lsa, ya'ni atomlarning panjaradagi davriy takrorlanishi to'g'ri bo'lsa, unda bu elementlarning hech qaysisi kirishma sifatida qatnashmaydi va panjarada tuzilish nuqsoni

shartida ko'rinmaydi. Suqilma qattiq eritmalar hosil bo'lishi- o'rinbosar qattiq eritmalar hosil bo'lishiga nisbatan keskinroq geometrik shart bajarilishini talab qiladi. Odatda, bu eritmalarini asosiy atomlariga nisbatan kichik atom radiuslariga ega atomlar kristallga kirganda kuzatiladi. Ammo, yarimo'tkazgichlarda kirindi o'rinbosar va suqilma qattiq eritmalar ko'p uchraydi. Bunday qattiq kirindi eritmalar, masalan, mis va temir guruhi elementlarini germaniyga, kremniyga kiritilganda va $A^{III}B^V$ birikmalarda yuzaga keladi.

Kristall panjaraning lokal deformatsiyasi kirishmalar kiritilganda yuzaga keladi va nuqson hosil bo'lish energiyasining kamayishiga olib keladi. Yot atom va asosiy modda atomlari o'lichamlari o'rtasidagi farq ortgani sayin nuqson hosil qilish energiyasi kamayib boradi. Fridel bo'yicha panjarada yot atom yaqinida vakansiya hosil qilish energiyasi ΔH_s ga kamayadi. Uni taxminan ushbu ifodadan aniqlasa bo'ladi:

$$\Delta H_s \approx \frac{6\pi(r_s - r_s')^2 r_s'}{Z(1+\alpha)\chi}, \quad (2.7)$$

bu yerda

$$\alpha = \frac{(1+p)\chi}{2(1-p)\chi} \frac{r_s'}{r_s} \quad (2.8)$$

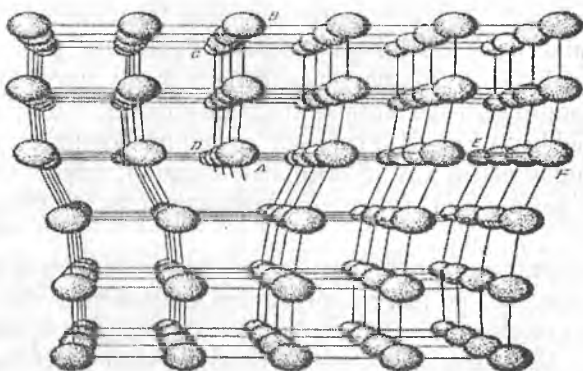
Bunda: r_s va r_s' — yot atom va asosiy modda atomining ionli radiuslari, χ' va χ — asosiy va erigan modda siqiluvchanligi, p — asosiy moddaning Puasson koeffitsienti, Z — kristall-erituvchining koordinatsion soni. Nuqson hosil qilish energiyasining kamayishi, tabiiyki, kristallarda termodinamik muvozanat issiqlik nuqsonlarining zichligi ortishiga olib keladi.

2.10. Dislokatsiyalar

Dislokatsiyalar-kristall tuzilishlarining ko'p uchrab turuvchi nomukammalligidir. Dislokatsiyalar deb o'sish jarayoni yoki plastik deformatsiyalar vaqtida kristallning ma'lum zonalarida vujudga keluvchi siljishlar natijasida yuzaga keluvchi kristall tuzilishning buzilishiga aytiladi. Dislokatsiyalarning yuzga asosiy ko'rinishi mavjud:

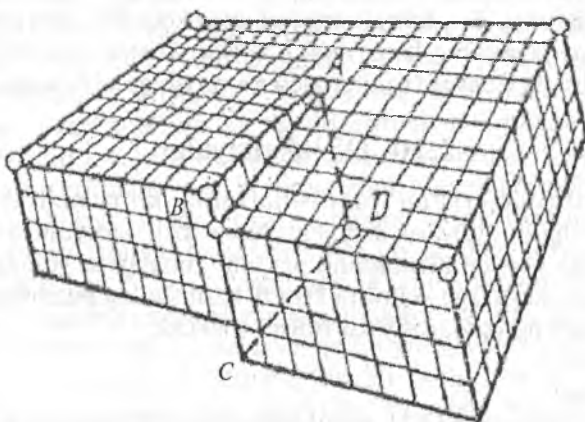
- chizig'iy,
- vintsimon.

Chizig'iy dislokatsiya (2.11-rasm) kristallning bir zonasining boshqasiga nisbatan siljishi natijasida yuzaga kelishi mumkin, bunda kristallning bu



2.11-rasm. Chiziqiy dislokatsiya modeli. ABCD — sirpanish tekisligi.
Chiziqiy dislokatsiya.

zonalarida atom tekisliklarining soni 1 ga farq qiladi. Kristallning eng buzilgan zonasi siljishi tekisligida dislokatsiya markazi bo'ladi. Markaz atrofidan to to'g'ri tuzilish tiklanish chegarasiga bo'lgan zona dislokatsiya zonasi deb atalishi mumkin. Chizig'iy dislokatsiyalar siljish vektoriga perpendikulyar tekislikda, vintsimon dislokatsiyalar shu vektorga parallel tekislikda hosil bo'ladi. Vintsimon dislokatsiyalarda kristall bor qalinligi bo'ylab siljish vektori tomon shunday siljiydiki. bunda kristallning bu zonasida bir-birlari ustiga parallel joylashish o'rniga vintsimon zinapoyaga zinapoyaga o'xshash yuza hosil bo'ladi.



2.12-rasm. Vintsimon dislokatsiya modeli. ABCD — sirpanish tekisligi.

Kristall ichida siljish zonasining chegaralanganligi bois, dislokatsiyalar berk holatda yoki kristall chegarasida tugallangan bo'lishi kerak. Ko'pincha dislokatsiyalar kristall yuzasida tugallanadi. Shuning uchun tajriba sharoitda dislokatsiyalarning kristall yuzasiga chiqishi joylari sifatida-edirish shakllari bo'lib kuzatilishi mumkin.

Dislokatsiyalarni izohlash uchun Byurgers vektori \vec{b} kiritilgan — bu kristallning buzilmagan zonasidagi chizig'iy nomukammallik atrofida joylashgan konturni berkituvchi kesmadir.

Bunday kontur Byurgers konturi deb ataladi (2.12-rasm). Byurgers vektorining ishorasi Byurgers konturi bo'yicha, aylanib chiqish yo'nalishiga bog'liq. Bu esa odatda o'ng vint qoidasi bo'yicha tanlanadi. Byurgers vektori panjaraning translyatsion vektoriga karrali. Agar dislokatsiya bir atom tekisligini ikkinchisiga nisbat siljishi natijasida hosil bo'lgan bo'lsa, Byurgers vektori siljish vektoriga mos keladi.

Dislokatsiyalar kristall bo'ylab siljishi tekisligida yoki unga tik ravishda harakat qilishi mumkin. Dislokatsiya siljish tekisligida harakatlanganda siljish zonasi ortadi va kristall plastik ravishda deformatsiyalanadi. Dislokatsiyaning tik yo'nalishdagi harakati modda tashib o'tilishi-diffuziya bilan bog'liq. Bunda uzilgan atom tekisligining qayta tiklanishi dislokatsiyalashgan atom yoki panjaraning yaqin turgan tuguni atomi birikishi yo'li bilan amalga oshadi. Bu o'ziga xos atom tekisligining keyingi uzilishi chetki atomning tugunlar oralig'iga ketishi yoki uning yaqinida paydo bo'lgan vakantsiya bilan rekombinatsiyalashi yo'li bilan ro'y berishi mumkin.

Dislokatsiyalar ko'chishi uncha katta bo'lmagan energiya sarfini talab qiladi. Temperatura ortishi bilan ko'chish tezligi keskin ortadi. bu esa ularning o'zaro yo'q qilinishiga (qarama-qarshi yo'nalgan ikki dislokatsiyalar uchrashganda) yoki yagona dislokatsiya hosil bo'lishiga olib keladi. Buning natijasida kristallga uzoq davrli issiqlik ishlovi berish dislokatsiyalar zichligini kamaytiradi va kristall tuzilishini mukammallashtiradi.

Kristallning mukammallik darajasi dislokatsiyalar zichligi bilan xarakterlanadi, u kristall yuzasi birligidagi edirish chuqurchalarining soni bo'yicha aniqlanadi. Kristallning egilishi bilan dislokatsiya yaratishda dislokatsiya zichligi ρ va bukilish radiusi r orasida sodda munosabat kuzatiladi:

$$\rho = \frac{1}{rb}. \quad (2.9)$$

Dislokatsiyalar mavjudligi kristallning faqat mexanik xossalarigagina emas, balki ularning elektrik xossalariga ham, (ayniqsa, yarimo'tkazgichli

kristallarda) ta'sir ko'rsatadi. Dislokatsiyalarning yarimo'tkazgichlarning elektrik xossalriga ta'siri quyidagi omillar bilan belgilanadi:

1. Kristall tarkibidagi kirishmalar dislokatsiyalar zonalarida panjaraning potensial energiyasi kamayishi natijasida, shu zonalarga o'tadilar (diffuziya yo'li bilan) va dislokatsiyalar atrofida kirishmalar to'planishini hosil qiladilar (kirishmali atmosfera). Bu fikr tajriba sharoitida mis bilan legirillangan kremniy kristallarida tasdiqlangan. Kremniy na'munasida infraqizil nurdan olingan mikro suratlar ko'rsatishicha, misning to'planish yuzasidagi edirish chuqurchalari oldida tugallanuvchi ipsimon yo'llar zonasida kuzatiladi.

2. Uzilgan tekislik chizig'iy dislokatsiya chegarasida to'yinmagan bog'lanishli atomlar zanjiri mavjudligi kristallning energetik spektrida qo'shimcha lokal elektron sathlar hosil qiladi. Germaniy misolida bu sathlar akseptor bo'ladi va ular man qilingan zonada o'tkazuvchanlik zona tubidan 0,2 eV qadar pastda joylashadi.

3. Dislokatsiya borligi harakatchan tok tashuvchilar rekombinatsiyasi va sochilishi jarayonlariga ta'sir qiladi. Dislokatsiyalar tomonidan sochish tok tashuvchilarining harakatini kamaytiradi.

Biroq dislokatsiyalarning odatiy zichligida ($\sim 10^3 - 10^5 \text{ sm}^{-2}$) germaniyda, masalan, harakatchanlikning oz kamayishi kuzatiladi (xona temperaturasida). Dislokatsiyalar rekombinatsiya jarayonlariga va demakki, nomuvozanat tok tashuvchilar yashash vaqtiga ham sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Germaniyda dislokatsiyalar zichligi ortishi bilan chizig'iy ravishda pasayadi. Shuning uchun, minimal zichlikdagi dislokatsiyali germaniy, kremniy va boshqa yarimo'tkazgich materiallarni olish yarimo'tkazgich kristall yaratish texnikasidagi dolzarb vazifa bo'lib turibdi.

Dislokatsiyalar, shuningdek, yarimo'tkazgichlarda kirishmalarning eruvchanligi va diffuziya jarayonlariga ham katta ta'sir ko'rsatadi. Yuqorida aytib o'tilganidek, dislokatsiyalar kirishmalarning to'planish joyi bo'lib xizmat qiladi. Bu ayniqsa, harakatchan kirishmalar (masalan, Cu, Ni germaniyda, Au va Cu kremniyda va boshqalar), holda kuzatiladi. Ularning kristalldagi bog'lanish energiyasi dislokatsiyalardagidan ko'ra kamroq. Dislokatsiyalar mavjudligi eruvchanlikni oshirishini va bunday kirishmalarning kristalldagi diffuziya tezligini kamaytirishini kutish lozim. Boshqa tomondan, dislokatsiyalar shuningdek, vakansiyalar manbai bo'lib ham xizmat qiladi. Shuning uchun agar kirishma diffuziyasi atomlarning vakansiyalar bo'ylab harakati orqali ro'y bersa, dislokatsiyalar mavjudligi diffuziya tezligini ortishiga ham olib kelishi mumkin.

Dislokatsiyalarning diffuziya tezligiga va kirishmalar eruvchanligiga ta'sirini o'rganish yarimo'tkazgich kristallarning tuzilish nuqsonlari bilan kirishmalarning o'zaro ta'sir mexanizmini aniqlashda muhim ahamiyatga ega.

Takrorlash uchun savol va masalalar

1. Ideal va real kristallarning asosiy farqlari nimada?
2. Nuqsonlarning turlari va paydo bo'lish sabablarini ayting?
3. Frenkel va Shottki nuqsonlarini tushuntiring?
4. Radiatsion nuqsonlarning paydo bo'lish mexanizmlari qanday?
5. Yarimo'tkazgich kristillardagi boshqa nuqsonlar?
6. Tarkibida $5 \cdot 10^{16} \text{ sm}^{-3}$ konsentratsiyali kirishmasi bo'lgan germaniy uchun 300 K temperaturada taqiqlangan zona o'rtasiga nisbatan Fermi sathi aniqlansin. (*Javob: $F = 0,196 \text{ eV}$.)*)
7. Tarkibida 10^{17} sm^{-3} konsentratsiyali surma atomlari va $5 \cdot 10^{16} \text{ sm}^{-3}$ konsentratsiyali indiy atomlari bo'lgan germaniyda 300 K temperaturada o'tkazuvchanlik zonasini tubiga nisbatan Fermi sathi aniqlansin. (*Javob: $F = -0,16 \text{ eV}$.)*)
8. Agar $m_p^* = 0,4m_0$ bo'lsa, hona temperaturasida p-tipli kremniy kristalida akseptorlarning qanday konsentratsiyasida Fermi sathi valent zona shipi bilan mos keladi? (*Javob: $N_a = 6,33 \cdot 10^{18} \text{ sm}^{-3}$.)*)
9. Donorlar konsentratsiyasi $N_d = 2 \cdot 10^{14} \text{ sm}^{-3}$, akseptorlar konsentratsiyasi $N_a = 3 \cdot 10^{14} \text{ sm}^{-3}$ bo'lgan germaniyning 300 K temperaturada elektronlar va kovaklar konsentratsiyalari aniqlansin. (*Javob: $n_p = 6,25 \cdot 10^{12} \text{ sm}^{-3}$, $p_p = 10^{14} \text{ sm}^{-3}$.)*)

3-BOB. KRISTALLARDA NUQTAVIY NUQSONLAR TERMODINAMIKASI

3.1 Asosiy termodinamik kattaliklar

Kristallardagi nuqtaviy nuqsonlarning muvozanat holatlarini taxlil qilish uchun statistik termodinamikaning asosiy kattaliklari va munosabatlari ishlatiladi. Berilgan bosim (p), hajm (V) va temperaturada (T) nuqtaviy nuqsonlarning muvozanat konsentratsiyasi Gibbs energiyasining minimumi orqali aniqlanadi:

$$G=U-TS+pV. \quad (3.1)$$

Bu yerda: U -ichki energiya, S -entropiya. Ichki energiya kristall to'la energiyasidan kinetik energiyaning ayirmasi orqali aniqlanishi mumkin, yoki

$$U=\sum N_i U_i \quad (3.2)$$

Bu yerda: U_i —har bir zarraning energiyasi, N_i — U_i energiyaga ega bo'lgan zarralar soni.

Nuqtaviy nuqsonlar hosil bo'lishi atomlar (ionlar) joylashuvidagi tartibsizlikka olib kelganligi uchun bu jarayon entropiyaning oshishiga sabab bo'ladi.

$$S=k \ln P. \quad (3.3)$$

Bu yerda P — sistemaning teng ehtimolli holatlari soni. Nuqtaviy nuqsonlar nazariyasida bu entropiyani konfiguratsion entropiya deb yuritiladi. chunki u kristalldagi zarralarning qayta taqsimlanishi bilan bog'liq. Bu kattalik bilan bir qatorda termik entropiya tushunchasi ham kiritiladi. U sistema tebranish modlarining teng ehtimolli holatlarini tavsiflash uchun xizmat qiladi. Kristallni $3N$ ta garmonik ossilyatorlardan tashkil topgan deb faraz qilib, termik entropiyani

$$S_t=3Nk(1+\ln(kT/hv)) \quad (3.4)$$

ko'rinishda tasavvur qilish mumkin. Kristallning to'la energiyasi

$$S=S_t+S_k. \quad (3.5)$$

Qattiq jismlarda normal sharoitda pV juda kichik bo'lganligi uchun uni hisobga olmaslik mumkin. Shuning uchun

$$G=U-TS=F, \quad (3.6)$$

bu yerda F — termodinamik potensial. Boshqa tomondan entalpiya H , ichki energiya U , bosim va hajm

$$H=U+pV \quad (3.7)$$

ifoda orqali bog'langan va pV kichik bo'lganligi uchun H ko'pincha G ga almashtiriladi.

Barcha ko'rib o'tilgan kattaliklar shuningdek zarralar sonining ham

funktsiyasidir, ya'ni zarralar soni o'zgarsa, bu kattaliklarning barchasi o'zgaradi. Shuning uchun N termodinamik potensialga parametr sifatida bog'liq:

$$F = N\mu(p, T). \quad (3.8)$$

U holda erkin energiyani quyidagicha yozish mumkin

$$G = U - TS + pV + \mu N, \quad (3.9)$$

bu yerda μ — kimyoviy potensial. Uni G , H , F , S larni N bo'yicha differensiallab aniqlash mumkin. Bunda sistema bir xil zarralardan tuzilgan deb faraz qilinadi. Agar sistema bir jinsli bo'lmasa, unda kimyoviy potensial gradienti yuzaga keladi va sistemada muvozanat yuz berishi bu gradientning yo'qolishiga olib keladi.

Shunday qilib, bir jinsli bo'lmagan sistemada kimyoviy potensialning doimiyligi termodinamik muvozanat sharti bo'lib hizmat qiladi. Har xil zarralar (yoki nuqsonlar) bo'lgan holda har bir tur zarra uchun kimyoviy potensial kiritiladi.

Agar qaralayotgan sistema tashqi maydonda joylashtirilgan bo'lsa, kimyoviy potensial qiymati har bir zarra potensial energiyasiga o'zgaradi

$$\mu = \mu_0 + U. \quad (3.10)$$

Muvozanat sharti butun sistemada μ ning doimiyligi bo'ladi.

Kristallardagi turli nuqtaviy nuqsonlar ta'sirlashuvchi massalar qonunidan kelib chiquvchi termodinamik munosabatlar orqali bog'langan

$$aA + bV + \dots \rightarrow lL + mM + \dots \quad (3.11)$$

ko'rinishidagi reaksiyalar uchun bu qonun

$$\frac{N_L^l N_M^m \dots}{N_A^a N_B^b \dots} = K_f(T) \quad (3.12)$$

ko'rinishda yozilishi mumkin. Bu yerda N_A^{a-} komponentalar (nuqsonlar)

konsentratsiyalari. $K_f(T)$ — faqat T ga bog'liq o'tish reaksiyasi muvozanat

doimiysi. $K_f(T)$ shuningdek to'g'ri va teskari reaksiyalar tezliklari nisbati orqali aniqlanishi mumkin.

$$K_c(T) = K_1/K_2. \quad (3.13)$$

Ta'sirlashuvchi massalar qonuni nuqsonlar konsentratsiyasi kichik bo'lganda va ular o'rtasidagi o'zaro ta'sir hisobga olinmaganda o'rinli bo'ladi. Kimyoviy termodinamikada bu qonun yuqori konsentratsiyali eritmalarda ham qo'llaniladi. Iekin bunda konsentratsiya o'rnida aktivlik ishlatiladi. Bu yerda aktivlik deganda qaralayotgan komponenta bosimining toza komponenta bosimiga nisbati tushuniladi

$$a_i = p_i / p_i^0. \quad (3.14)$$

Ba'zan aktivlik koeffitsienti ham kiritiladi

$$\gamma = a_i / x_i. \quad (3.15)$$

bu yerda x_i — komponentaning molyar ulushi.

Aktivlik va aktivlik koeffitsienti nafaqat konsentratsiyani, balki temperatura va bosimning ham funksiyasidir. Ular qattiq eritmalarni o'rganishda ham kiritilishi mumkin.

Shunday qilib, ta'sirlashuvchi massalar qonunidan muhim xulosa kelib chiqadi: sistemaning muvozanat sharoitida boshqa komponentalar konsentratsiyalarini o'zgartirmay turib, bitta komponenta konsentratsiyasini o'zgartirish mumkin emas. Bundan kimyoda qo'p komponentli moddalar yoki energiyalarini baholashda keng foydalaniladi. Jumladan, bir yacheykadagi zarralar konsentratsiyani oshirish hisobiga boshqa yacheykadagi zarralar konsentratsiyasi kamayadi.

3.2 Elementar kristallarda Frenkel nuqsonlari konsentratsiyasiga temperaturaning ta'siri

Kristallardagi issiqlik nuqsonlari konsentratsiyasi kristall temperaturasi va nuqson hosil bo'lish energiyasi bilan aniqlanadi. Nuqson hosil bo'lish energiyasi kimyoviy bog'lanishlar mustahkamligi ya'ni bog'lanish energiyasiga bog'liq. Shuning uchun kristalldagi nuqsonlar konsentratsiyasini temperaturaga bog'liqligini ko'rib chiqamiz. Nuqson hosil bo'lish energiyasini Δu bilan belgilaymiz, u atomni tugundan tugunlar orasiga o'tkazish uchun kerak bo'lgan ishini bildiradi. 1 sm^3 da tugunlardagi atomlar soni N , tugunlar orasidagi atomlar soni N' bo'lsin deb faraz qilaylik, T temperaturada n ta atom tugundan tugunlar orasiga o'tdi va shuncha vakansiya hosil bo'ldi. Bu jarayonda entropiya ortadi. Bu holdagi konfiguratsion entropiya

$$\Delta S_k = k(\ln P' + \ln P^*). \quad (3.16)$$

Bu yerda P' , P^* — n ta qo'shimcha atomni N' ta tugunlar orasidagi atomlar ichiga va n ta vakansiyaning N ta tugunlarga joylashtirish usullari

$$P' = \frac{N'^n}{(N' - n)! n!}, \quad (3.17)$$

$$P^* = \frac{N^n}{(N - n)! n!}. \quad (3.18)$$

Bu ifodalarni (3.16) ga qo'yib va Stirling formulasidan foydalanib

$$\Delta S_k = k\{[N \ln N - (N - n) \ln (N - n) - n \ln n] + [N' \ln N' - (N' - n) \ln (N' - n) - n \ln n]\} \quad (3.19)$$

ifodani hosil qilamiz. To'la entropiyani topish uchun bu ifodaga ΔS_T ni qo'shish kerak. Atomlarning tugunlardan tugunlar orasiga o'tishi ichki energiyani

$$\Delta U_F = n \Delta u_F \quad (3.19')$$

ga o'rtishiga olib keladi. Bu holda Gibbs erkin energiyasi

$$G = n(\Delta u_F - TS_T + p\Delta V) - kT\{[N \ln N - (N-n) \cdot \ln(N-n) - n \ln n] + [N' \ln N' - (N'-n) \ln(N'-n) - n' \ln n']\} \quad (3.20)$$

ko'rinishni oladi. Bu yerda p — bosim, ΔV — hajm o'zgarishi. Nuqsonlarning issiqlik muvozanati sharti erkin energiyani n ga nisbatan minimumi orqali aniqlanadi

$$\frac{\partial G}{\partial n} = 0.$$

(3.20) ni differensiallab

$$\Delta u_F - T\Delta S_T + p\Delta V = kT \ln\left(\frac{(N-n)(N'-n)}{n^2}\right) \quad (3.21)$$

ni olamiz. Bu yerdan bosim ta'sirini hisobga olmasak,

$$n = \sqrt{(N-n)(N'-n)} \exp(\Delta S_T/2k) \exp(-\Delta u_F/2kT). \quad (3.22)$$

yoki $n \ll N, N'$ bo'lganligi uchun

$$n = \sqrt{NN'} \exp(\Delta S_T/2k) \exp(-\Delta u_F/2kT). \quad (3.23)$$

Frenkel nuqsoni hosil bo'lishida termik entropiyaning ortishi nuqson yaqinida panjara atomlari tebranish chastotasining o'zgarishi bilan bog'liq. ΔS_k ni

$$\Delta S_k = S_T' - S_T = 3kZ \ln v/v' \quad (3.24)$$

ko'rinishda yozish mumkin. Bu yerda: v, v' — Frenkel nuqsoni borligida va yo'qligida tebranish chastotalari, Z — konfiguratsion son. Bu ifodani (3.23) ga qo'yib

$$n = \sqrt{NN'} (v/v')^{3/2} \exp(\Delta S_T/2k) \exp(-\Delta u_F/2kT) \quad (3.25)$$

ifodani hosil qilamiz. Bu ifodadan Frenkel nuqsonlari konsentratsiyasi temperaturaga eksponentsial ravishda proporsional ekanligi kelib chiqadi. NN' daraja ko'rsatkichidagi 1/2 bir vaqtda tugunlararo atom va vakansiya hosil bo'lishini bildiradi.

3.3. Elementar kristallarda Shottki nuqsonlari konsentratsiyasining temperaturaga bog'liqligi

Shottki nuqsoni hosil bo'lishida Gibbsning erkin energiyasi

$$\Delta G = n \Delta u_F - kT \ln \frac{N!}{(N-n)!n!} - nT\Delta S + p\Delta V_v \quad (3.26)$$

orqali ifodalanishi mumkin. Bu yerda ΔU_v – vakansiya hosil bo‘lish energiyasi. $\Delta V - 1$ ta vakansiya hosil bo‘lishida hajmning o‘zgarishi. n – vakansiya konsentratsiyasi. ΔV – bitta atom hajmiga teng emas, chunki

har bir vakansiya atrofida panjara relaksatsiyasi yuzaga keladi. $\frac{\partial G}{\partial n} = 0$

shartdan konsentratsiyaning temperaturaga bog‘lanishini olamiz

$$n = N \exp(\Delta S_v/k) \exp(-\Delta u_v/kT). \quad (3.27)$$

Agar vakansiya yaqinida $v' < v$ chastotali z kirishma atomlari bo‘lsa, kristalda $3nZ$ ta v' chastotali, $3N - 3nZ$ ta v chastotali ossilyatorlar hosil bo‘ladi. Bu yerdan termik entropiyaning ortishi

$$\Delta S_T = 3Zk \left(1 + \ln \frac{kT}{hv'}\right) + 3(N/n - Z)k \left(1 + \ln \frac{kT}{hv}\right) - 3N/n \left(1 + \ln \frac{kT}{hv}\right) = 3Zk \ln v/v' \quad (3.28)$$

ga teng bo‘ladi. Bu ifodani (3.27) ga qo‘ysak,

$$n = (v/v')^3 z \cdot N \exp(-\Delta u_v/kT)$$

hosil bo‘ladi.

3.4. Divakansiyalar va birlashmalar hosil bo‘lishi

Vakansiyalar konsentratsiyasi ma’lum bir miqdordan ortganda kristalda divakansiya, trivakansiya va nuqsonlarning murakkab birlashmalar hosil bo‘ladi va ular ko‘plab vakansiya birlashmasidan iborat bo‘shliqlar hosil bo‘lishiga olib kelishi mumkin. Vakansiyalarning bunday birikishi sistemaning termodinamik muvozanat sharti tufayli sodir bo‘ladi. chunki polivakansiyalar hosil bo‘lish energiyasi har doim monovakansiyalarning birikish energiyasidan kichik bo‘ladi. Masalan, divakansiya hosil bo‘lish energiyasi ikkita vakansiyaning hosil bo‘lish energiyasidan kichik, ya’ni

$$\Delta U^{(2)} = 2 \Delta U^{(1)} - B, \quad (3.29)$$

bu yerda B — bog‘lanish energiyasi. Trivakansiya hosil bo‘lish energiyasi

$$\Delta U^{(3)} = 3 \Delta U^{(1)} - B^1, \quad (3.30)$$

bu yerda B^1 — 3 ta vakansiya hosil bo‘lish energiyasi.

Monovakansiyalar konsentratsiyasi va ularning birikishi orasidagi munosabatlar ta’sirlashuvchi massalar qonunidan foydalanib chiqarilishi mumkin. Masalan, 2 ta vakansiyaning divakansiyaga birikishi

$$B_1 + B_1 > B_2 \quad (3.31)$$

reaksiya orqali ifodalanishi mumkin. Konsentratsiyalarni N_{v1} , N_{v2} lar orqali belgilab

$$N_{v2} = k_1/k_2 N_{v1}^2 = k_1/k_2 N^2 \exp[(2 \Delta U - B)] \approx N_{v1}^2 N \exp(B/kT). \quad (3.32)$$

3 ta vakansiyalarning birikishi

$$N_{V3} = N_{V1}^2 \exp(B^1/kT). \quad (3.33)$$

Jiddiy hisob-kitoblar (32), (33) formulalarga qo'shni nuqsonlarning ta'sirlarini hisobga oluvchi birikma ko'paytuvchi kiritish kerakligini ko'rsatadi. Bu ko'paytuvchilar o'zaro bog'liq bo'lmagan vakansiyalar birlashmalarini hisoblash orqali aniqlanishi mumkin. Masalan, divakansiya uchun $S=z/3$. Ularning konsentratsiyasi

$$N_{V2} = ZN^2/2 \cdot \exp(-(2 \Delta U - B)) \quad (3.34)$$

bo'ladi.

3.5. Birikmalar hosil bo'lishi

Real kristallarda termik nuqtaviy nuqsonlardan tashqari yot atom kirishmalari ham bo'ladi. Bu kirishmalar nuqsonlar bilan o'zaro ta'sirlashib, birikmalar hosil qilishi mumkin. Birikmalar kirishmalar o'rtasida ham bo'lishi mumkin. Bunday birikmalarning hosil bo'lishi nafaqat termodinamik munosabatlarga, balki kirishmalar konsentratsiyasiga ham bog'liq. Kirishma atomlari va vakansiyalar birikmalarining konsentratsiyasi ta'sirlashuvchi massalar qonuni orqali aniqlanadi

$$V + C \rightarrow VC \quad (3.35)$$

Agar vakansiyalar va birikmalar konsentratsiyalarini N_k , N_v , N_c deb belgilasak

$$N_k = \alpha N_v N_c \exp(-\Delta u_k/kT), \quad (3.36)$$

munosabatni olamiz. Bu yerda: ΔU_k — birikma hosil bo'lish energiyasi, α — kirishma atomini vakansiya bilan qo'shni bo'lish ehtimolligi.

Xuddi shunday usul bilan akseptor va donor xarakterli kirishmalar o'rtasida hosil bo'lgan birikmalar konsentratsiyasini ham aniqlash mumkin. Agar $A^{++}D^- \rightarrow C$ bo'lsa, muvozanat holatida ularning konsentratsiyasi

$$\frac{N_c}{N_A - N_H} = K_\alpha(T), \quad (3.37)$$

bo'ladi. Bu yerda $K_\alpha(T)$ — birikma hosil bo'lish doimiysi bo'lib, u temperaturaga eksponentsial ravishda bog'langan.

$$K_\alpha = \beta \exp(-\Delta u_s/kT), \quad (3.36)$$

β bog'lanmagan akseptor va donorlarning qo'shni bo'lish ehtimolligi.

3.6. Binar birlashmalarda termik nuqsonlar

Binar birlashmali kristallarda Frenkel va Shottki nuqsonlari panjarani har xil qismlarida hosil bo'lishi mumkin: 1) A panjaradagi vakansiya, 2) B

panjaradagi vakansiya, 3) A panjaradagi juft nuqson, 4) B panjaradagi juft nuqson, 5) A panjara atomlarining B panjara tugunlari orasiga o'tishi. 6) B panjara atomlarining A panjara tugunlari orasiga o'tishi. 7) A panjara atomlarining B panjara vakansiyasiga o'tishi. 8) B panjara atomlarining A panjara vakansiyasiga o'tishi. Agar bu kristallda yana kirishma atomlari ham bo'lsa, nuqtaviy nuqsonlar soni keskin ortib ketadi.

Kirishmasiz kristallarda turli nuqsonlarning konsentratsiyalari ta'sirlashuvchi massalar qonuniga bo'ysunadi. ularning umumiy konsentratsiyasi Gibbs energiyasining minimumidan topiladi.

A panjarada N_{iA} tugunlararo atom, B panjarada N_{iB} tugunlararo atom, N_{vA} , N_{vB} ta vakansiyalari bo'lgan AB binar kristalni ko'ramiz. α - A panjara tugunlari birligiga to'g'ri keluvchi tugunlararo atom, β - B panjara tugunlari birligiga to'g'ri keluvchi tugunlararo atom bo'lsin. Avvalgi punktdagiga o'xshash

$$\frac{N_{vA}}{N_A} \left(\frac{\alpha N_A - N_{iA}}{\alpha N_A} \right)^\alpha = \exp(-\Delta u_{vA}/kT), \quad (3.39)$$

$$\frac{N_{iA} N_A}{(N_A - N_{vA})} \frac{(\alpha N_A)^\alpha}{(\alpha N_A - N_{iA})^{\alpha+1}} = \exp(-\Delta u_{iA}/kT), \quad (3.40)$$

$$\frac{N_{vB}}{N_B} \left(\frac{\beta N_B - N_{iB}}{\beta N_B} \right)^\beta = \exp(-\Delta u_{vB}/kT), \quad (3.41)$$

$$\frac{N_{iB} N_B}{(N_B - N_{vB})} \frac{(\beta N_B)^\beta}{(\beta N_B - N_{iB})^{\beta+1}} = \exp(-\Delta u_{iB}/kT), \quad (3.42)$$

bu yerda $\Delta U_{\epsilon A}$, ... A va B panjaralarda vakansiya va tugunlararo atom hosil bo'lish energiyalari. Odatda, $\alpha = \beta = 1$ bo'lganligi uchun:

$$N_{iA} = N_{vA} \sqrt{2} N_A \exp\left(-\frac{\Delta u_{iA} + \Delta u_{vA}}{kT}\right), \quad (3.43)$$

$$N_{iB} = N_{vB} \sqrt{2} N_B \exp\left(-\frac{\Delta u_{iB} + \Delta u_{vB}}{kT}\right). \quad (3.44)$$

Yuqoridagi barcha formulalarda ΔS_T termik entropiyaning o'zgarishi hisobga olinmadi. Uni hisobga olish $\exp(\Delta S_T/k)$ ko'paytmani yuzaga keltiradi. Binar kirishmalar uchun ΔS_T ni hisoblash o'ta murakkab.

Ion kristallarda odatda juft nuqsonlar emas, balki Shottki nuqsonlari: anion panjarada musbat vakansiyalar, kation panjarada manfiy vakansiyalar yuzaga keladi. Zaryadning saqlanish qonuniga asosan, ularning

konsentratsiyalari teng bo'lad. Agar kristalda elektron yoki kovak bo'lsa, bu tenglik bajarilmaydi. Har bir panjarada nuqsonlar konsentratsiyalari ta'sirlashuvchi massalar qonidan topiladi

$$N_{vA} N_{vB} / N^2 = K(T) = \exp\left(-\frac{\Delta u_{vA} + \Delta u_{vB}}{kT}\right). \quad (3.45)$$

Bu ifodaning birinchi hadi $U(V_0)$ ning minimumi bo'lganligi uchun 0 ga teng.

Kristallning issiqlikdan kengayish koeffitsienti

$$\alpha = (V - V_0) / V_0 T$$

ni kiritib

$$du/dV = \alpha V_0 T (d^2u/dV^2)_{V_0}$$

ifodani olamiz yoki

$$\alpha = -\frac{3k}{V_0} \frac{d \ln v}{dV} / \frac{d^2u}{dV^2}$$

Nuqson hosil bo'lish energiyasi kristall energiyasi bilan bog'liq bo'lganligi uchun uning kengayishi hisobga olingan. Shottki nuqsoni hosil bo'lish energiyasi

$$\Delta u_v = \Delta u_v^0 + \alpha V_0 T d \Delta u_v / dV. \quad (3.51)$$

Frenkel nuqsoni hosil bo'lish energiyasi

$$\Delta u_F = \Delta u_F^0 + \alpha V_0 T d \Delta u_F / dV. \quad (3.52)$$

Bu yerda $\Delta u_v^0 - T=0$ da nuqson hosil bo'lish energiyasi.

Ikkala ifodada ham hosilalar manfiy. (3.51), (3.52) larni (3.24), (3.26) larga qo'yib,

$$n_F = (NN')^{1/2} (v/v')^{3Z} \exp(-\Delta u_F^0 / 2kT) \exp\left(-\frac{\alpha V_0}{2k} \frac{d \Delta u_F}{dV}\right), \quad (3.53)$$

$$n_v = N(v/v')^{3Z} \exp(-\Delta u_v^0 / 2kT) \exp\left(-\frac{\alpha V_0}{2k} \frac{d \Delta u_v}{dV}\right). \quad (3.54)$$

larga ega bo'lamiz.

$$\exp\left[-\left(\frac{\alpha V_0}{2k} \frac{d \Delta u_F}{dV}\right)\right] = A \quad \exp\left[-\left(\frac{\alpha V_0}{2k} \frac{d \Delta u_v}{dV}\right)\right] = V$$

almashtirishlar bajarib, Frenkel va Shottki nuqsonlari konsentratsiyalari uchun quyidagi formulalarni olamiz:

$$n_F = A (NN')^{1/2} (v/v')^{3Z} \exp(-\Delta u_F / 2kT), \quad (3.55)$$

$$n_v = B (v/v')^{3Z} N \exp(-\Delta u_v / 2kT). \quad (3.56)$$

NaCl kristalli uchun $(v/v')^{3/2}$ ning qiymati Mott tomonidan baholangan.

$\alpha 1/2 \cdot 10^{-4}$ bo'lganda $\Delta u_v = 1,7$ eV, $d \ln \Delta u_v / d \ln V = 2$, $v/v' = 2$, $Z = 2$ va $B \approx 100$, $(v/v')^{3Z} \approx 64$ bo'ladi. Boshqa kristallarda A va B lar qiymatlari $10 \div 100$ orasida yotadi. Shottki va Frenkel nuqsonlari hosil bo'lish energiyasini hisoblash o'ta murakkab bo'lib, hozirgacha oxiriga etkazilmagan masaladir.

Ionni kristall hajmidan sirtiga ko'chirish energiyasi ion kristallar uchun 10 eV, yarimo'tkazgichlar uchun bir necha eV ni tashkil etadi. Nuqson hosil bo'lish energiyasini aniqlash uchun panjaraning elastik relaksatsiyasini va har bir nuqson atrofidagi panjara qutblanishini hisobga olish kerak. Bu esa nuqson hosil bo'lish energiyasini kamaytiradi.

Shottki nuqsoni hosil bo'lishida panjara elastik deformatsiya energiyasi $\sim 1/R^3$ bo'lib, juda kichik miqdordir. Shuning uchun nuqson hosil bo'lishiga katta energiyali qo'shni atomlar kuchli ta'sir ko'rsatadi. Tugunlararo atom hosil bo'lishida panjara sezilarli darajada buziladi. Bu xolda qo'shni atomlar siljishi panjara doimiysining 20% gacha etadi. elastik deformatsiya energiyasi esa bir necha eV gacha etadi.

Nuqson atrofida elektr zaryadlarining qayta taqsimlanishi. ya'ni qo'shni ionlarning qutblanishi nuqson hosil bo'lish energiyasining kamayishiga kuchli ta'sir ko'rsatadi.

Ionli kristallarda birinchi koordinatsion sferadagi zaryadlar boshqalariga nisbatan ko'proq siljiydi. Bu nuqson atrofida elektr maydoni hosil bo'lishiga va nuqson hosil bo'lish energiyasining kamayishiga olib keladi.

Shottki nuqson hosil bo'lish energiyasi birinchi marta Iost tomonidan hisoblandi. uni quyidagicha yozish mumkin:

$$\Delta u_v = \Delta u_v' - e\varphi / 2, \quad (3.57)$$

osh tuzi uchun

$$\Delta u_v' = -k_v e^2 / a(1 - 1/p), \quad (3.58)$$

bu yerda: $k_v = 1,746$ — Madelung doimiysi, $1/p$ — sirtlararo masofa, a — o'zaro itarish kuchini hisobga oluvchi had. Vakansiyani shar shaklidagi bo'shliq deb hisoblab, uning markazidagi potensialni

$$\varphi = \int_x^{\infty} \frac{P}{r^2} 4\pi r^2 dr \quad (3.59)$$

ko'rinishda yozish mumkin, bu yerda qutblanish

$$P = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right) \frac{e}{r^2}, \quad (3.60)$$

bu yerda: ϵ — dielektrik doimiy, r — vakansiya radiusi.

U holda

$$\varphi = \left(1 - \frac{1}{\epsilon}\right) \frac{e}{x} \quad (3.61)$$

(3.59) integralning aniqligi quyi chegaraning aniqligiga bog'liq. Xantington va Zeytslar tomonidan ba'zi metallarda (Cu, Ag, Au) vakansiya va divakansiya hosil bo'lish energiyalari hisoblangan va ular tajriba natijalari bilan asosan mos keladi.

Takrorlash uchun savol va masalalar

1. Nuqtaviy nuqsonlarga temperaturaning ta'siri qanday?
2. Birikmalar nima va ular qanday paydo bo'ladi?
3. Binar birikmalardagi termik nuqsonlar tabiati qanday?
4. Nuqson hosil bo'lish energiyasining tarkibi qanday?
5. Qotishma usulida olingan germaniyli diodda $N_d=10^3 \cdot N_a$, har bir akseptor atomga 10^8 ta germaniy atomi mos keladi. Xona temperaturasida potensial to'siq balandligini toping. (Javob: $\varphi=0,33$ V.)

6. 285 K temperaturada yarimo'tkazgichli diodda $p_p=10^{17} \text{ sm}^{-3}$, $p_n=10^{11} \text{ sm}^{-3}$ va $p-n$ o'tish qalinligi $\Delta=10^{-4} \text{ sm}$, $D_p=49 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $p-n$ o'tishdagi kovaklar konsentratsiyasi chiziqli qonunga bo'ysunadi deb hisoblab, kovaklarning diffuziya toki zichligi aniqlansin. (Javob: $J=8300 \text{ A}/\text{sm}^2$.)

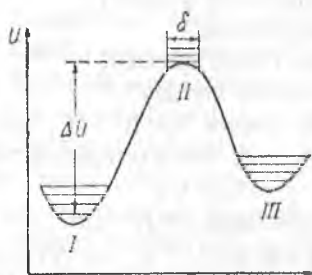
7. Bir jinsli va bir o'lchamli n -turli yarimo'tkazgichda yorug'lik zondi yordamida zaryad tashuvchilar juftlari hosil qilinmoqda. Agar zonddan 2 mm masofadagi nomuvozanatli zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi 10^{14} sm^{-3} , 4,3 mm masofada esa 10^{13} sm^{-3} bo'lsa, kovaklarning diffuziya uzunligi aniqlansin. (Javob: $L_p=1 \text{ mm}$.)

8. Agar yorug'lik kvantlari zichligi $J=6 \cdot 10^{18} \text{ sm}^{-2}/\text{s}$, kvant chiqishi $\eta=1$, sirtiy rekombinatsiya tezligi 500 sm/s, kovaklarning yashash vaqti $\tau_p=10^{-4} \text{ s}$, diffuziya uzunligi $D_p=49 \text{ sm}^2/\text{s}$ bo'lsa, kuchli yorug'lik yutadigan n -turli qalin germaniy na'munasining yoritilayotgan sirtidagi nomuvozanatli kovaklar konsentratsiyasi aniqlansin. (Javob: $\Delta_p(0)=0,5 \cdot 10^{14} \text{ sm}^{-3}$.)

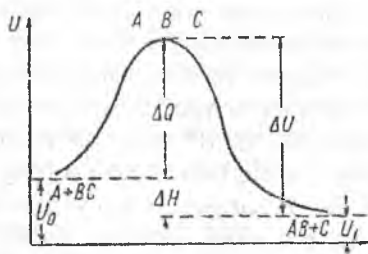
4-BOB. YARIMO‘TKAZGICHLARDA DIFFUZION JARAYONLAR KINETIKASI

4.1. Diffuziya va reaksiyalarning mutlaq tezligi nazariyasi

Kinetika nazariyasiga asosan diffuziya va parchalanish yoki kimyoviy birikmalar hosil bo‘lishi reaksiyalari o‘rtasida yaqin o‘xshashlik bor.



4.1-rasm. $A+B$ holatdan $AB+C$ holatga o'tishda sistema potensial energiyasining o'zgarishi.



4.2-rasm. Boshlag'ich (I), faollashgan (II) va oxirgi (III) holatlarda sistemaning energetik sathlari.

Haqiqatda, AB molekulaning A va B atomlarga parchalanishi ($AB \rightarrow A+B$) yoki qayta jarayon ($A+B \rightarrow AB$) zarralarning ma'lum reaksiya energetik to'sig'ini engishi orqali amalga oshiriladi. Diffuziyalanuvchi zarraning bir muvozanatli holatidan boshqasiga o'tishi bu zarraning ikkala muvozanatli holati orasidagi energetik to'siqni engib o'tish bilan bog'liq (4.1-rasm). Bu hol diffuziya jarayoni uchun reaksiyalarning mutlaq tezligi nazariyasi usulini qo'llab bu nazariyada olingan natijadan diffuzion parametrlarni hisoblash uchun foydalanish mumkin.

Reaksiya tezligi nazariyasining asosiy g'oyasi quyidagicha. Zarralar sistemasining boshlang'ich holatdan yakuniy holatga o'tishi bilan bog'liq har qanday jarayon shunday tarzda kechadiki, bunda sistema qandaydir kritik holatdan o'tadi. Bu o'tish holati faollashgan kompleks nomini olgan. Aktivlashtirilgan kompleksni sodda holda A atomi va BC molekula o'rtasidagi reaksiyalar misolida ko'rsatish mumkin (4.2-rasm). Tasavvur qilaylik, A va BC yaqinlashuvida almashinish reaksiyasi ro'y beradi:



Aytaylik, BC molekulasida yakka atomlar bir-biri bilan kovalent bog'langan, A atom esa bitta toq valent elektronga ega bo'lsin. U_0 bilan sistemaning boshlang'ich potensial energiyasini belgilaymiz. Endi A atomini

BC molekula bilan yaqinlashtira boshlaymiz. Bunda elektronlarning o'zaro ta'siri asosida atomlar orasidagi tortishuv BC molekulasida kamayib boradi va A atomi bilan BC molekula o'rtasidagi itarishuv ortadi.

Bu hol sistema potensial energiyasining ortishiga olib keladi. Keyin A va BC orasida masofa muayyan qiymatga etganda sistema kritik holatga keladi, bunda A va B , B va C orasidagi tortishuv va itarishuv kuchlari teng bo'ladi. A va BC ning yanada yaqinlashuvi A ga B ning tortishishi va C ning itarilishiga olib keladi. Bu jarayon sistemaning potensial energiyasi kamayishi bilan uning U_1 potensial energiyali yangi $AB+C$ holatiga o'tgunga qadar davom etadi.

4.1-rasmdan ko'rinishicha, sistema bir holatdan boshqasiga o'tishidan oldin, ya'ni almashinuv reaksiyasigacha, ta'sirlanuvchi zarralar energetik to'siq maksimumiga teng energiyaga ega bo'lishlari lozim. $A-B-C$ atomlarining maksimum nuqtasidagi joylashuvi faollashtirilgan holat yoki faollashgan kompleksdir. Bu holatda atomlar shunday joylashganki, B yoki A bilan, yoki C bilan bog'lanishi mumkin. Atomlarning reaksiya koordinatorlari absissa o'qi yo'nalishidagi har qanday kichik siljishi sistemani yoki yakuniy holatga o'tishiga yoki boshlang'ich holatiga qaytishiga olib kelishi mumkin. Potensial egri chiziq maksimumi energiyasi bilan sistemaning boshlang'ich holatidagi energiyasi farqi — shu jarayonning ΔQ faollash energiyasini hosil qiladi. 4.1-rasmdan ko'rinishicha, sistemaning qayta o'tishi $\Delta U = \Delta Q + \Delta H$ potensial bar'erni yengib o'tishi bilan bog'liq. Bu yerda ΔH — bir tomondan $AB+C$, boshqa tomondan $A+BC$ birikmalari orasidagi issiqlik saqlash orasidagi farqi, ya'ni doimiy bosimdagi reaksiya issiqligi.

Bunday kimyoviy reaksiya kinetikasi son jihatdan ham baholanishi mumkin. Statistik munosabatlardan foydalanib, faollashtirilgan komplekslar zichligini, ularning o'rtacha yashash vaqtini, faollashtirilgan kompleksning to'siq cho'qqisidan o'tish tezligi bilan aniqlanuvchi reaksiya tezligini, muvozanatni doimiy va boshqa muhim kattaliklarni hisoblab topiladi. Masalan, faollashgan komplekslar N^* zichligi to'siq cho'qqisida quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$N^* = Nf, \quad (4.2)$$

bu yerda N — molekularning hajm birligidagi umumiy soni. Bir o'chlamli xol uchun faqat ilgari noma harakatning erkinlik darajasi hisobga olinadi, δ — kenglikdagi potensial o'rada harakatlanuvchi zarra energiyasi sathlar to'plamiga ega (4.2-rasm) bo'lib ular quyidagi tenglikdan topiladi:

$$\varepsilon_n = \frac{n^2 h^2}{8\delta^2 m}, \quad (4.3)$$

bunda: m — zarra massasi, n — imkoniy energetik sathlar soni, h — Plank doimiysi. Taqsimot funksiyasi f bu holda quyidagi integral bilan ifodalanadi:

$$f = \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right) dn. \quad (4.4)$$

(4.3) ni (4.4) ga qo'yib, taqsimot funksiyasi uchun quyidagi ifodani olamiz

$$f = \left\{ \frac{2\pi mkT}{h} \right\}^{1/2} \delta, \quad (4.5)$$

bundan

$$N^* = N \left(\frac{2\pi mkT}{h} \right)^{1/2} \delta. \quad (4.6)$$

Bu ifodalardan, reaksiya tezligini ham topish mumkin. Ma'lumki, har qanday kimyoviy reaksiya tezligi faollashgan komplekslarning sig'im birligidagi zichligi va potensial to'siq cho'qqisidan o'tish soni bilan aniqlanadi. δ — kenglikdagi to'siq orqali faollashgan komplekslarning o'tish o'rtacha tezligi \bar{v} ni quyidagicha aniqlaymiz:

$$\bar{v} = \frac{\delta}{\tau^*}, \quad (4.7)$$

bu yerda τ^* — faollashgan komplekslarning reaksiya potensial to'sig'idan o'tish vaqti. U holda, bunday reaksiya tezligi K (reaksiya potensial to'sig'i orqali vaqt birligida o'tgan zarralar soni) quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$K = \frac{N^*}{\tau^*}. \quad (4.8)$$

Faollashgan komplekslarning potensial to'siq orqali o'tishining o'rtacha ilgarilanma tezligi \bar{v} , harakat to'g'ri reaksiya yo'nalishida borganda va tezliklar taqsimoti Maksvell statistikasiga bo'ysunganda quyidagicha yozilishi mumkin:

$$\bar{v} = \frac{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) v dv}{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv} = \left(\frac{kT}{2\pi m} \right)^{1/2}. \quad (4.9)$$

Bu yerdan faollashgan kompleksning to'siq orqali o'tishining o'rtacha vaqti — faollashgan kompleksning o'rtacha yashash davomiyligi bo'ladi:

$$\tau^* = \frac{\delta}{g} = \delta \left(\frac{2\pi m}{kT} \right)^{1/2}. \quad (4.10).$$

Reaksiya tezligi (4.6) ni e'tiborga olgan holda quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$K = N^* \frac{v}{\delta} = N \frac{kT}{h}. \quad (4.11)$$

Bunda, to'siq orqali o'tayotgan har bir faollashgan kompleks parchalanadi va qayta o'tishlar yo'q deb taxmin qilinadi. Umumlashtirilgan holda qayta o'tishlarni ham, o'tish koeffitsienti η ni kiritgan holda, e'tiborga olish mumkin. Boshqa tomondan, reaksiya tezligini quyidagicha ifodalash mumkin:

$$K = K_0 N_A N_B \dots \quad (4.12)$$

Bu yerda: K_0 — shu reaksiyaning nisbiy tezligi, $N_A N_B$ — ta'sirlashuvchi tarkiblovchilar zichligi (4.11) ni (4.12) bilan taqqoslasak,

$$K_0 = \frac{kT}{h} \frac{N}{N_A N_B \dots} = \frac{kT}{h} K_c. \quad (4.13)$$

ifodani olamiz. Bu yerda: K_c — ta'sirlashuvchi tarkiblovchi va faollashgan tarkiblovchilar o'rtasidagi muvozanat doimiysi. Boshlang'ich modda faollashgan tarkiblovchilar bilan muvozanat holida turganda, muvozanat doimiysi ham boshlang'ich va yakuniy holatlar taqsimot funksiyasi nisbati orqali ifodalanadi:

$$K_c = \frac{F^*}{F_A F_B \dots} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right). \quad (4.14)$$

Bu yerda $F^* F_A F_B$ — faollashgan kompleks va ta'sirlanuvchi tarkiblovchilarning to'liq taqsimoti funksiyalarini ifoda etadi. F ning qiymatlari barcha holatlar uchun (ilgarilanma, tebranma va boshqa harakat turlari) eksponensial ko'paytirgich — sistema holatining boshlang'ich va yakuniy nol sathlar ΣF_i ga teng farqini inobatga oladi. (4.13) ni e'tiborga olgan holda, reaksiyalarning nisbiy tezligini

$$K_0 = \frac{kT}{h} \frac{N}{F_A F_B \dots} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \quad (4.15)$$

ko'rinishida yozish mumkin.

Reaksiyalarning mutlaq tezligi nazariyasini vakansiya diffuziyasiga ham

qo'llash mumkin, ularni reaksiyada ishtirok etuvchi tarkiblovchilaridan birining kvazi zarralari sifatida ko'rish mumkin.

4.2. Diffuziya uchun Eynshteyn munosabatlari

Diffuziya va tashqi elektr maydon E ta'sirida muvozanatda turgan zaryadlangan zarrachalar sistemasini olaylik. Bu holda sistemadan tok o'tmaydi va bir o'lchovli holat uchun tok zichligi

$$j = qNuE - D \cdot \partial N / \partial x = 0 \quad (4.16)$$

va

$$E = -\partial \varphi / \partial x, \quad (4.16')$$

bu yerda: φ — E maydon potentsiali, N , q , u — zarrachalar zichligi, zaryadi va harakathanligi, D — diffuziya koeffitsiyenti. (4.16) ni (4.15) ga qo'yib va integrallab quyidagini hosil qilamiz:

$$N = \text{const} \cdot \exp(-u/D\varphi). \quad (4.17)$$

Boshqa tomondan qaralsa, E potensial maydondagi zarrachalar uchun Bolsman taqsimoti haqli ekanligini e'tiborga olib

$$N = \text{const} \cdot \exp(-q\varphi/kT) \quad (4.18)$$

ni yozish mumkin. (4.17) va (4.18) ni bir-biriga solishtirsak, Eynshteyn tenglamasini olamiz:

$$u/D = q/kT. \quad (4.19)$$

Bu munosabatni har ikki tomonini Nq ga ko'paytirsak $\frac{uNq}{D} = \frac{Nq^2}{kT}$ yoki

$$\sigma/D = Nq^2/kT \quad (4.20)$$

ni olamiz. (σ — solishtirma elektr o'tkazuvchanlik). Bu ifoda Bolsman statistikasiga bo'ysunuvchi har qanday muvozanatda turuvchi zaryadlangan zarrachalar tizimi uchun mos kelaveradi.

Qutblangan kristallarda ion o'tkazuvchanlik va o'z-o'ziga diffuziya hodisalarini o'rganishida olingan tajriba natijalari ko'rsatishicha ayrim hollarda bu munosabatlar bajarilmaydi.

Buni sabablaridan biri bunday kristallarda diffuziyada qatnashadigan, lekin tok o'tkazishda ishtirok etmaydigan elektroneytral komplekslarni hosil bo'lishi mumkin. Qutblangan kristallarda atomlarning halqa yoki o'rin almashish usulida diffuziyalanishida ham (4.19) munosabat bajarilmaydi. Chunki bu holda atom(ion)lar zaryad tashishda ishtirok etmaydi. Bunday hollarda

$$\sigma/D < Nq^2/kT \quad (4.20a)$$

tengsizlik kuzatiladi. Lekin ayrim tajribalarda

$$\sigma/D > Nq^2/kT \quad (4.20b)$$

ham uchraydi. Bu holda tashqi maydon E va kristallarda harakatlanayotgan ionlarga ta'sir etuvchi ichki effektiv maydon E_{eff} larni farqlari sabab bo'lishi mumkin. E_{eff} va tashqi E maydonlar o'zaro quyidagi munosabat bilan bog'langan

$$E_{eff} = E(1 + \Delta). \quad (4.21)$$

Zaryadlangan zarrachalarni χ_0 dielektrik doimiylikka ega bo'lgan bir jinsli muhitda turgan χ_1 dielektrik doimiylikka ega sfera deb hisoblab, quyidagini yozish mumkin:

$$\Delta = \chi_1(\chi_0 - 1) / (2\chi_0 + \chi_1). \quad (4.22)$$

Hisoblashlarda (σ yoki u ni), odatda, E_{eff} emas E dan foydalanish uchun ularni qiymatlari $(1 + \Delta)$ marta katta chiqadi. Shuning uchun yuqori elektr qarshilikli qutblangan kristallar (dielektriklar) uchun Eynshteyn munosabati

$$\sigma / D = Nq^2(1 + \Delta) / kT \quad (4.23)$$

ko'rinishda bo'ladi. Mana shu qo'shimchani hisobga olmaslik (4.19) va (4.20) tengsizliklar hosil bo'lishiga olib keladi.

Qutblanish qo'shimchasi Δ ionlarni ko'chish mexanizmlariga mos holda har xil qiymatlariga ega bo'lishi mumkin. Misol uchun ionlarni tugunlararo xarakatlanishi holida $\chi_1 \approx \chi_0$ va $\Delta > 1$. Vakansiyalar bo'yicha ko'chish bo'lganda $\chi_1 = 1$ va shuning uchun $\Delta = 0,5$. Shularga asoslanib, Δ ni tajribaviy qiymatlarini (4.22) ifoda yordamida aniqlangan tajribaviy qiymatlarini hisoblash natijalari bilan solishtirish orqali qutbli kristallarda atomlar diffuziyasi mexanizimini aniqlash mumkin.

Tugunlararo diffuziya D_i holatida Eynshteyn munosabati aniq bajarilishi mumkin. Lekin radioaktiv izotoplar diffuziyasi usulida aniqlangan D avvalgi D_i dan farqli:

$$D = \frac{1 + \cos \theta}{2} \frac{N_i}{N} D_i, \quad (4.24)$$

bu yerda: θ — ionning qo'shni atomni o'z o'rnidan (tugunidan) siqib chiqarib, tugunga chiqib olish yo'nalishi bilan boshqa tugunlararo holatga o'tish yo'nalishlari orasidagi burchak, N_i va N — ionlarni tugunlar orasidagi va umumiy zichliklari. Elektr tokini o'tkazishda faqat tugunlararo joylashgan ionlar ishtirok etgani uchun:

$$\sigma / D = 2 \frac{\sigma}{D_i(1 + \cos \theta)} \frac{N}{N_i}. \quad (4.25)$$

Endi (4.18) dan foydalanib

$$\sigma / D = 2 \frac{Nq^2}{kT(1 + \cos \theta)} \quad (4.26)$$

ni hosil qilamiz. Hisoblarning ko'rsatishicha: $\theta \approx -0.33$. U holda

$$\frac{\sigma}{D} = 3 \frac{Nq^2}{kT}$$

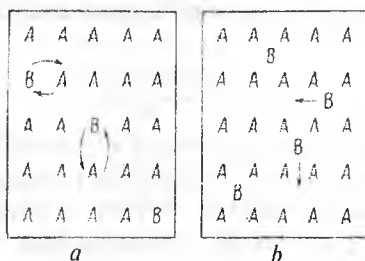
Shunday qilib, atomlar diffuziyasi tirqishlararo mexanizm bilan bo'lganda σ/D nisbat (4.18) dan 3 marta katta bo'lar ekan. Shu mulohazalar bilan ham atomlar diffuziyasi mexanizimini aniqlab olish mumkin.

4.3. Suqilma kirishma atomlarining diffuziyasi

Suqilma kirishma atomlar diffuziyasi jarayoni qattiq jismlardagi diffuziyaning eng sodda va yorqin misolidir. Diffuziya mexanizmi bu holda atomlarning bir tugunlar oralig'idan boshqasiga birin-ketin o'tishidir (4.3-b rasm). Suyultirilgan eritmalar holatida atomlar sakrashini bir-biriga bog'liq emas deb hisoblab va diffuziyani zarralarning betartib harakat jarayoni deb hisoblash mumkin.

Suqilma qattiq eritmalaridagi diffuziya koeffitsienti formulasini keltirib chiqarishga o'tishdan oldin, diffuziya — zarralarning betartib harakati jarayoni sifatidagi masalani umumiy holda ko'rib chiqamiz.

Faraz qilaylik, x o'qi yo'nalishida diffuziyalanuvchi zarralar zichligi gradienti mavjud. Unda diffuziya x o'qi bo'ylab Δx masofadagi zarralarning birin-ketin sakrashidan iborat bo'ladi. Bunda zarralarning oldinga va orqaga sakrash ehtimoli teng bo'lsin. Ikki sakrash orasidagi o'rtacha vaqtni τ deb belgilaymiz. X o'qi orqali o'tadigan yagona tekislik maydonida t vaqt oralig'ida diffuziya orqali o'tadigan zarralar sonini $N(t, x)$ bilan belgilaymiz.



4.3-rasm. Kristallarda kirishma atomlari diffuziyasi.
a) suqilma, b) tugunlararo.

Bunda $N(t, x)$ funksiya o'zgarishi kichik vaqt oralig'ida δt ($\delta t \ll \tau$) quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$N(t + \delta t, x) - N(t, x) = \frac{\delta t}{2\tau} [N(t, x - \Delta x) - 2N(t, x) + N(t, x + \Delta x)] \quad (4.27)$$

yoki

$$\frac{N(t + \delta t, x) - N(t, x)}{\delta t} = \frac{1}{2\tau} \{ [N(t, x - \Delta x) - N(t, x)] - [N(t, x + \Delta x) - N(t, x)] \}. \quad (4.28)$$

Bundan, $N(t, x)$ ni Δx masofada sekin o'zgaradi deb hisoblab va limitga o'tib, quyidagi differensial tenglikni olamiz:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{(\Delta x)^2}{2\tau} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}. \quad (4.29)$$

Bu Fikning ikkinchi qonunini ifodalaydi.

$$D = \frac{(\Delta x)^2}{2\tau}. \quad (4.30)$$

Bu formula berilgan yo'nalishda zarralarning tartibsiz harakati holatida diffuziya koeffitsienti ifodasini beradi. Ko'rib chiqilayotgan qattiq suqilma eritmalarda o'tishlar, atomlarning kristalda ma'lum bir geometrik holatlarda joylashuvi natijasida zarralarning harakati birmuncha tartibli bo'lishini nazarda tutish lozim. Shuning uchun (4.30) ni birmuncha boshqa ko'rinishda yozamiz:

$$D = \alpha \frac{d^2}{\tau}, \quad (4.31)$$

bu yerda: d — panjara doimiysi, α — kristall panjaraning elementar yacheykasi geometriyasiga bog'liq ko'paytma. Diffuziya holatida suqilma qattiq eritmalarda bu ko'paytma-diffuziyalanuvchi zarra o'tib ketishi mumkin bo'lgan qo'shni tugunlar oralig'i holatini joylashishini belgilaydi. Masalan, chegaralari kub panjaralar uchun α ko'paytirgich 1/12 va 1/24 ga teng. (4.31) formulaga kirgan noma'lum parametr τ — atomlarning bir tugunlar oralig'idan boshqasiga o'tishining o'rtacha vaqti. Shuning uchun qattiq suqilma eritmalarida diffuziya koeffitsientini hisoblash τ — parametrni hisoblashdan iborat bo'ladi.

Eyring, Vert va Zinerlar nazariyasiga asosan bu maqsadlar uchun reaksiyalarning mutlaq tezlik nazariyasi formulalaridan foydalanamiz. Atomlarning bir tugunlar oralig'idan boshqasiga o'tish chastotasini quyidagicha yozamiz:

$$\frac{1}{\tau} = \omega \frac{kT}{h} \frac{\varphi^*}{\varphi}, \quad (4.32)$$

bu yerda: ω — potensial to'siq cho'qqisidan o'tgan zarraning yana qaytib orqaga o'tmaslik ehtimoli, φ — boshlang'ich holatdagi erigan atom + panjara sistemasi uchun, ya'ni diffuziyalanuvchi atom potensial to'siqning tubida yotgan vaqtidagi taqsimot funksiyasi, φ^* — diffuziyalanuvchi atom

faollashgan holatda, ya'ni potensial to'siq cho'qqisida turgan vaqtdagi sistemaning taqsimlanish funksiyasi. Boshlang'ich holatdagi erigan atomning erkinlik darajasi faollashtirilgan holatdagidan ko'ra bir daraja ko'proq bo'lishligi bois (4.32) formulada φ^*/φ turli xil erkinlik darajasiga ega bo'lgan ikki funksiya nisbatini olish uchun φ ni ikki funksiya ko'paytmasi ko'rinishida ifodalash mumkin;

$$\varphi = \varphi_1 \varphi_1^*, \quad (4.33)$$

$\varphi_1 - \nu$ chastotada tebranuvchi chizig'iy ossillyator taqsimot funksiyasi; φ_1^* — diffuziya yo'nalishiga perpendikulyar tekislikda tebranuvchi eritilgan atom sistemasi uchun taqsimot funksiyasi, bunda erkinlik darajasi soni, faollashtirilgan atomlar sistemasiga teng. Diffuziya jarayonida $h\nu/kT < 1$, da

$$\varphi_1 = \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} \approx \frac{kT}{h\nu} \quad (4.34)$$

Boshqa tomondan, φ^*/φ bir xil erkinlik darajasi soniga ega bo'lgan ikki taqsimot funksiyasi nisbati sifatida $\exp(-\Delta G/kT)$ ga teng, bu yerda ΔG — sistemaning erkin energiyasining o'zgarishi. Shuning uchun

$$\frac{\varphi^*}{\varphi} = \frac{\varphi^*}{\varphi_1 \varphi_1^*} = \frac{h\nu}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right), \quad (4.35)$$

$$\frac{1}{\tau} = \nu \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right). \quad (4.36)$$

Erkin energiya ΔG o'zgarishini atomning muvozanat holatdan faollashgan holatga potensial to'siq cho'qqisiga o'tishidagi izotermik ishga tenglashtirish mumkin.

Potensial to'siq cho'qqisiga atomning o'tishidagi izotermik ish doimiy bosim ostida bo'lganligi sabab, termodinamik nisbatni qo'llab turib

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \quad (4.37)$$

$$\frac{1}{\tau} = \nu \exp\left(-\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right) \quad (4.38)$$

ifodaga ega bo'lamiz.

Bu qiymatni $1/\tau$ uchun (4.31) formulaga qo'yib, diffuziya koeffitsienti uchun quyidagiga ega bo'lamiz:

$$D = \alpha \nu d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right), \quad (4.39)$$

bu yerda: ΔS — faollashtirish entropiyasi, ΔH — faollashtirish issiqligi, u (2.8) formuladagi faollashtirish energiyasiga teng. D_0 quyidagi tenglik

orqali topiladi:

$$D_0 = \alpha v d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right), \quad (4.40)$$

(4.40) formulani etiborga olib (4.39) ni quyidagi ko'rinishda yozamiz.

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right). \quad (4.41)$$

Agar faollashtirish energiyasini modda gramm-moliga hisob qilsak, (4.39) va (4.40) formulalar quyidagi ko'rinishga ega bo'ladi:

$$D = \alpha v d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right), \quad (4.42)$$

$$D = \alpha v d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right). \quad (4.43)$$

(4.43) formulaga kiruvchi v kattalikka — kristall panjaraning tugunlar oralig'idagi diffuziyalanuvchi atomning tebranish chastotasi deb qarash mumkin. ΔS parametrni — atomlarning faollashgan holatga o'tishi — ya'ni diffuziyalanuvchi atomlarning gramm-mol issiqligining o'zgarishini ifodalaydi.

v ning kattaligini baholash uchun Vert va Ziner tahmin qilishicha, erigan atomning bir tugunlar oralig'idan boshqasiga o'tishida atomning potensial energiyasi $U(x)$ garmonik qonun

$$U(x) = \frac{1}{2} \Delta H \left(1 - \cos 2\pi \frac{x}{\lambda}\right) \quad (4.44)$$

bo'yicha o'zgaradi, bu yerda: x — yo'l koordinatasi, λ — ikki tugunlar oralig'idagi masofa, ΔH — faollashish issiqligiga teng bo'lgan ikki tugunlar oralig'idagi potensial to'siq balandligi. Tebranish chastotasi v bu holda

$$v = \left(\frac{\Delta H}{2m\lambda^2}\right)^{1/2} \quad (4.45)$$

ga teng, bu yerda m — erigan atom massasi. (4.45) formulani (4.40) ga qo'yib, quyidagini olamiz (ΔS — bir gramm-mol ga tegishli):

$$D_0 = \alpha \left(\frac{\Delta H}{2m\lambda^2}\right)^{1/2} d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right). \quad (4.46)$$

Entropiya ko'paytirgichi $\exp(\Delta S/R)$ ni bilvosita yo'l bilan baholash mumkin, buning uchun quyidagi taxminlarga asoslaniladi. Agar barcha ish panjaraning elastik energiyasiga o'tsa, unda

$$\Delta G = \frac{1}{2} \mu l^2 V_a, \quad (4.47)$$

bu yerda: μ — siljish moduli, l -siljish deformatsiyasi, V_n — deformatsiya joylashgan hajm. Agar relaksatsion jarayonlarni inkor qilsak, masalan, donachalar chegarasida, birinchi yaqinlashuvda temperaturaning chizig'iy funksiyasi bo'ladi:

$$\mu = \mu_0 + T \frac{\partial \mu}{\partial T}, \quad (4.48)$$

μ_0 — temperatura mutlaq nol bo'lgandagi siljish moduli. Bundan temperatura o'zgarishida L va V_n ning o'zgarishlarini e'tiborga olmasak va

$$\Delta S = - \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \quad (4.49)$$

ni e'tiborga olsak,

$$\Delta S = -\Delta H \left[\frac{d\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)}{dT} \right] \quad (4.50)$$

ifodani olamiz. $\frac{\partial \mu}{\partial T} < 0$ ekanligi sababli, ΔS kattalik musbat, $\exp(\Delta S/R)$ ko'paytuvchi esa doim birdan katta. (4.50) formulani e'tiborga olgan holda (4.46) dan topilgan D_0 qiymatlari bir qator suqilma qattiq eritmalari uchun tajriba natijalari bilan qoniqarli darajada mos tushadi. ΔH faollashish energiyasi qiymatini hisoblash uchun, oldin aytib o'tilganidek, qoniqarli, to'g'ri yoki bilvosita yo'llar hali topilmagan.

4.4. O'rinbosar qattiq eritmalarda diffuziya hodisasi

Bu holda ham diffuziya mexanizmi elementar kristallardagidek bo'ladi va erigan atomlar panjaraning vakant tugunlari (vakansiyalar) ga sakrash yo'li bilan kristalda ko'chib yurishi mumkin. Agar erigan atom yaqinida vakansiya hosil bo'lishi osonroq bo'lsa, bu holda diffuziya atomlar va vakansiyalar birlashmasi ko'chishi yo'li bilan amalga oshishi mumkin. Ushbu geterodiffuziya jarayoniga o'z diffuziya yo'ldosh bo'ladi. Ammo vakansiyalar yot atomlar bilan, erituvchi atomlarga nisbatan, ancha tez joy almashinadi, binobarin, geterodiffuziya o'z diffuziyadan ustun keladi.

Bir qator hollarda diffuziya jarayonlari diffuziya sohasida yangi fazaning — boshqa tuzilishli va o'zgacha fizik xossali modda vujudga kelishiga sabab bo'ladi. Yangi fazaning paydo bo'lishiga bir qancha sabablar bor. Mana ulardan biri: asosiy va diffuziyalanuvchi atomlarda bir hil holatlardagi

valent elektronlarning bo'lishi va «yarimo'tkazgichlik me'yorining» bajarilishligi oqibatida diffuziya sohasida $A^{III} B^V$, $A^{II} B^{VI}$ va h.k. Yarimo'tkazgich birikmalar paydo bo'lishiga olib kelishi mumkin. Yangi fazaning vujudga kelishi diffuziya jarayonini sekinlatishga olib keladi. Mana shu hodisa reaktiv diffuziyadir.

4.5. Kirkendoll va Frenkel effektlari

Ikki metall yoki qotishmalarning o'zaro diffuziyasida parsial diffuziya koeffitsiyentlaridagi farq natijaviy modda oqimi yuzaga kelishiga va bo'linish chegarasining siljishiga olib keladi. Chegaraning bunday siljishi birinchi marta Kirkendoll va Smigelskas tomonidan mis va latunning o'zaro diffuziyasida kuzatilgan. Tajriba quyidagicha o'tkazilgan: to'g'ri burchakli brusok shaklidagi α — ning yon sirtiga qator molibden o'tkazgichlar mahkamlangan, ularning ikkinchi uchi brusok aylanma chegarasiga chiqarilgan. Keyin brusokning bu sirti mis bilan qoplangan va diffuzion kuydirilgan. Tadqiqotlar diffuzion kuydirish simlar qatori siljishiga olib kelishini bu siljish kuydirish vaqtiga ildiz ostida proporsional bo'lishini ko'rsatdi. Bu siljish ancha katta bo'lib, bunga sabab mis va jezning diffuziya koeffitsiyentlari ancha farq qilishidadir, $j_{Zn} > j_{Cu}$.

Bu chegara qatlamni o'z ichiga olgan diffuzion sohaning hajm bo'yicha o'zgarishiga olib keladi: mis tomonda yangi atom tekisliklar yuzaga keladi, jez tomon esa ichkariga surilib, nuqsonlar hosil bo'lishining oldini oladi.

Bunda aynan chegara yuzasi suriladi. Shuning uchun, simchalar ham suriladi. Kirkendoll effektida chegara sirtining surilishi Silva va Mel tajribalarida ham ko'rgazmali namoyish etiladi. Ular mis-jez chegara qatlamiga yupqa uc burchak shaklidagi metall folga kiritishgan.

Kuydirish jarayonida asosan mis va jezning o'zaro diffuziyasi faqat uch burchak uchida yuz berib, qolgan qismlarda diffuziya to'xtagan. Natijada diffuzion kuydirishdan so'ng folgani bu uchini yechilishi kuzatilgan.

Kirkendoll effekti juda ko'p qator qotishmalarda kuzatilgan. Bunda barcha hollarda siljish erish temperaturasi past tomonga ro'y bergan.

Kirkendoll effekti yuz berishi uchun asosiy shart alohida komponentlarni parsial diffuziya koeffitsiyentlaridagi farqdadir.

Kirkendoll effektini atom tuzilishi nuqtai nazardan tushintirilganda u vakansion, tugunlar aro mexanizmlari yoki donadorlik chegaralari bo'yicha ro'y berishi mumkin. Almashish yoki siklik mexanizmlarda bir komponent oqimi paydo bo'lishi va chegaraning siljishi mumkin emas. Mis-jez sistemasida diffuziyaning vakansion mexanizmida vakansiya mis atomlariga nisbatan ruh atomlari bilan osonroq o'rin almashadi. Bu mis tomonga ruh

atomlari oqimining misning jez tomonga oqimidan ustunlik qilishiga olib keladi. Boshqa tomondan vakansiyalar mis tomondan jez tomonga siljiydi, bu jez tomondan mis tomonga oqayotgan atomlarni kompensatsiyalaydi.

Kirkedoll effekti Darken tomonidan miqdoriy tavsiflangan, u buning uchun ko'p komponentli sistemalarda parsial diffuziya koeffitsiyentlari va termodinamik munosabatlardan foydalangan.

D_A va D_B parsial diffuziya koeffitsiyentlariga va chegara qatlamda mos N_A va N_B konsentratsiyalarga ega bo'lgan binar sistemani ko'rib chiqamiz. Faraz qilaylik, Kirkendoll effekti natijasida chegara qatlam tezlik bilan surilayotgan bo'lsin. Bu holda chegara qatlamdan o'tayotgan komponentlar oqimi uchun ikkita differensial tenglamalarni yozish mumkin:

$$j_A = -D_A \frac{\partial N_A}{\partial x} + vN_A, \quad (4.51)$$

$$j_B = -D_B \frac{\partial N_B}{\partial x} + vN_B. \quad (4.52)$$

Agar bu holda Fikning ikkinchi qonuni bajarilayotgan bo'lsa,

$$\frac{\partial N_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (D_A \frac{\partial N_A}{\partial x} - vN_A), \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial N_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (D_B \frac{\partial N_B}{\partial x} - vN_B). \quad (4.54)$$

Sistemaning har bir nuqtasida $N_A + N_B = N - \text{const}$ bo'lgani uchun

$$\frac{\partial}{\partial t} (N_A + N_B) = \frac{\partial}{\partial x} (D_A \frac{\partial N_A}{\partial x} + D_B \frac{\partial N_B}{\partial x} - vN) = 0 \quad (4.55)$$

integrallagandan so'ng

$$D_A \frac{\partial N_A}{\partial x} + D_B \frac{\partial N_B}{\partial x} - vN = B. \quad (4.56)$$

Integrallash doimiysi B ni

$$x = \pm\infty, \quad \frac{\partial N_A}{\partial x} = \frac{\partial N_B}{\partial x} = 0 \text{ va } v = 0$$

shartdan aniqlash mumkin.

Bu yerdan $B=0$ va

$$v = \frac{1}{N} (D_A \frac{\partial N_A}{\partial x} + D_B \frac{\partial N_B}{\partial x}), \quad (4.57)$$

$\frac{\partial N_A}{\partial x} = \frac{\partial N_B}{\partial x}$ bo'lganligi uchun

$$v = (D_A - D_B) \frac{\partial \gamma_B}{\partial x}, \quad (4.58)$$

bu yerda $\gamma_A = \frac{N_A}{N}$. U holda:

$$\frac{\partial N_{A,B}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \{ [D_{A,B}(1 - \gamma_{A,B}) + D_{B,A}\gamma_{A,B}] \frac{\partial N_{A,B}}{\partial x} \}. \quad (4.59)$$

Kvadrat qavs ichidagi ifoda geterodiffuziyaning effektiv koeffitsiyenti deyiladi, odatda u binar qotishmalarda tajribada o'lanadi:

$$D = D_{A,B}(1 - \gamma_{A,B}) + D_{B,A}\gamma_{A,B}. \quad (4.60)$$

D koeffitsiyent parsial diffuziya koeffitsiyentlariga va komponentalar konsentratsiyalari nisbatiga bog'liq bo'ladi va qarama-qarshi komponentalar oqimi teng bo'lganda diffuzion oqim tezligini xarakterlaydi.

Turli parsial diffuziya koeffitsiyentlari mavjudligi shuningdek qotishmalardagi bo'shliqlar bilan ham bog'liq bo'lib, buni o'rganish muhim texnik masala hisoblanadi.

Parsial diffuziya koeffitsiyentlardagi farqning vakansion mexanizmida zarralarning siljishi nafaqat chegaraning siljishiga, atomlar yuqori harakatchanlikka ega bo'lgan chegara yaqinidagi sohada ortiqcha vakansiyalar paydo bo'lishiga olib keladi. Vakansiyalarning bunday to'planishi bo'shliqlarni paydo bo'lishiga olib keladi. Frenkel effekti deb ataluvchi bu jarayon, vakansiyalarni diffuziyalanayotgan atomlar kirishiga qarshi yo'nalishda xarakatlanishi natijasidir.

Atomlar o'zdiffuziyasining vakansion mexanizimiga asosan diffuzion oqim uchun quyidagi ifodani yozish mumkin:

$$j = D \nabla N_v - [D_A^v N_A + D_B^v N_B] \nabla N_v + N_v [D_A^v x_A - D_B^v x_B] \nabla N_A, \quad (4.61)$$

bu yerda: N_A, N_B — A va B komponentalarning nisbiy konsentratsiyalari, N_v, D_v — vakansiyalar konsentratsiyasi va diffuziya koeffitsiyenti, $D_A = D_v^A N_v x_A$ — A va B atomlarning geterodiffuziya koeffitsiyentlari, $D_A = D_v^A N_v x_B$ — toza A va B komponentalardagi vakansiyaning diffuziya koeffitsiyentlari:

$$x_{A,B} = 1 - \frac{N_{A,B}}{kT} \frac{d\omega_{A,B}}{dN_{A,B}}, \quad (4.62)$$

bu yerda: $\omega_{A,B}$ — bitta AB atomni cheksizlikka ko'chirishdagi ish. (4.61) dan ko'rinib turibdiki, j vakansion oqim j' va j'' oqimlar yig'indisiga teng:

$$j' = (D_A^v N_A + D_B^v N_B) \nabla N_v, \quad (4.63)$$

$$j' = (D_A - D_B) \nabla N_A. \quad (4.64)$$

Bunda faqat $D_A \neq D_B$ bo'lganda $j'' \neq 0$ va vakansiya konsentratsiyasi gradiyenti ko'p bo'lganda ham mavjud bo'ladi ($\nabla N = 0$). j'' oqimning mavjudligi ko'p atomlar ketib qolayotgan qotishmani vakansiya bilan to'yinishiga va diffuziyon bo'shliqlar hosil bo'lishiga olib keladi.

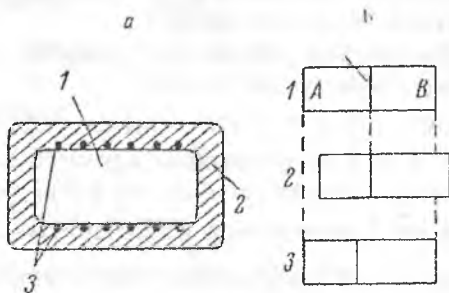
Frenkel va Kirkendoll effektlari parsial diffuziya koeffitsiyentlaridagi farq bilan bog'liq bo'lsa ham ular o'zaro raqobatchi effektlar hisoblanadi: diffuziyon bo'shliq yo'q bo'lganda, chegara siljishi maksimum bo'ladi, Frenkel effekti chegara siljimiganda maksimum bo'ladi.

Qotishma va qattiq eritmalarda Frenkel effekti bilan bir qatorda teskari Frenkel effekti ham yuz beradi: notekis parsial o'zdiffuziyada diffuziya uyg'onadi. Haqiqatan, vakansion mexanizmida A va B atomlarning geterodiffuziya oqimini

$$j_A = -D_A^v [-N_A \nabla N_v + N_v x_A \nabla N_A], \quad (4.65)$$

$$j_B = -D_B^v [-N_B \nabla N_v + N_v x_B \nabla N_B] \quad (4.66)$$

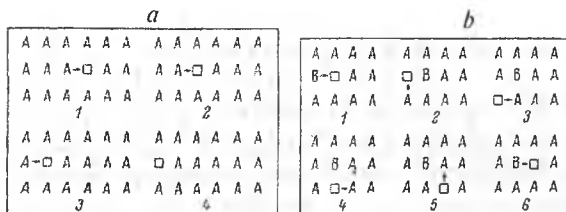
ko'rinishda yozish mumkin. (4.65) va (4.66) dan ko'rinib turibdiki, vakansiyalar konsentratsiyasining gradienti mavjud bo'lsa, A va B atomlar tekis taqsimlangan bo'lsa ham, j_A va j_B oqimlar turlicha bo'ladi va bu bir jinsli namunalarda A va B atomlarning notekis taqsimlanishiga va diffuziya paydo bo'lishiga olib keladi (4.4-rasm).



4.4-rasm. Kirkendoll effektiga doir.

4.6. Metallarda va boshqa elementar kristallardagi xususiy atomlar diffuziyasi

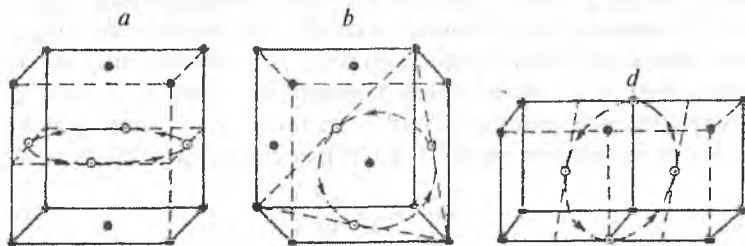
Metall va boshqa elementar kristallardagi o'z diffuziya mexanizmi suqilma qattiq eritmalardagi diffuziyaga nisbatan ancha murakkab xarakterga ega.



4.5-rasm. Vakansion diffuziya. a) o'z-o'ziga diffuziya, b) kirishma diffuziyasi.

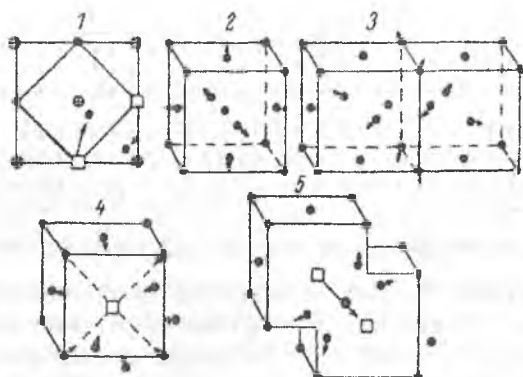
Bu yerda kristall bo'ylab atomlarning xarakatlanishi uchun turli imkoniyatlar bor: 1) atomlarning to'g'rima-to'g'ri o'rin almashinuvi; 2) «halqali mexanizm» - halqa bo'ylab joylashgan atomlar gruppasining mos harakati; 3) tugunlar oraliqlari bo'ylab atomlarning siljishi; 4) vakansiyalar bo'ylab atomlar harakati (4.5-rasm).

Bu mexanizmlardan qaysi biri haqiqatda amalga oshishi haqidagi masala har bir hol uchun qo'shimcha tekshirishlarni talab qiladi. Ammo, yuqorida aytib o'tilganidek, ko'pincha, hech bo'lmaganda zich tahlanishli kristallar uchun, diffuziyaning vakansiya mexanizmi amalga oshiriladi, ushbu mexanizm quyida ko'rib chiqiladi.



4.6-rasm. (Ziner bo'yicha) diffuziyaning halqali mexanizmi a — (4 ta atom ishtirokida) yoqlari markazlashgan kubik panjarada, b — (3 ta atom ishtirokida) yoqlari markazlashgan kubik panjarada, d — (4 ta atom ishtirokida) hajmiy markazlashgan qismlard.

Vakansiyalar bo'ylab diffuziya (4.18) formula orqali tavsif etilishi mumkin, bunda atomlarning sakrashi bir-biriga bog'liq bo'lmagan va yo'nalishi bo'yicha tartibsiz xarakterga ega bo'ladi deb hisoblanadi. (4.20) formulaning α ko'paytirgichi vakansiyalar bo'ylab o'z diffuziya holida chegarasi markazlashgan kub panjara uchun 1/2 va hajmi markazlashgan panjara uchun 1/8 ga teng. τ parametrni aniqlash uchun, shuningdek, (4.25) formuladan ham foydalanish mumkin, uni biz boshqacha ko'rinishda yozamiz:



4.7-rasm. Atomlarning joy almashishi mumkin bo'lgan mexanizmlari.

$$\frac{1}{\tau} = \omega \nu \exp\left(-\frac{\Delta G_2}{RT}\right), \quad (4.67)$$

bu yerda: ΔG_2 — atomning muvozanat holatdan faollashgan holatga o'tishidagi izotermik ishga teng bo'lgan erkin energiyaning o'zgarishi; ν — kristall panjara tugunlaridagi atomlarning muvozanat holatidagi tebranish chastotasi Debay chastotasiga teng; p — diffuziyaning ekvivalent yo'llarining soni, u chegarasi markazlashgan kub panjara uchun 12 ga, hajmi markazlashgan panjara uchun 8 ga teng. ω — yaqin joylashgan tugunlar bo'sh ekanligi ehtimoli. ω kattalik quyidagicha yozilishi mumkin:

$$\omega = \exp\left(-\frac{\Delta G_1}{RT}\right), \quad (4.68)$$

bu yerda ΔG_1 — vakansiya hosil bo'lishidagi erkin energiyaning o'zgarishi (doimiy temperatura va bosimda). (4.68)ni (4.67) ga qo'yib, keyin $1/\tau$ ni (4.20) ga qo'yib, o'zdiffuziya koeffitsientini topamiz:

$$D = d^2 \gamma \exp\left(-\frac{\Delta G_1 + \Delta G_2}{RT}\right). \quad (4.69)$$

Termodinamik munosabatlar

$$\Delta G_1 = \Delta H_1 - T\Delta S_1, \quad \Delta G_2 = \Delta H_2 - T\Delta S_2 \quad (4.70)$$

va (4.37) tengliklardan foydalanib (4.69) ni quyidagicha yozish mumkin,

$$D = d^2 \gamma \exp\left(\frac{\Delta S_1 + \Delta S_2}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_1 + \Delta H_2}{RT}\right), \quad (4.70)$$

bu yerdan

$$D_o = d^2 \gamma \exp\left(\frac{\Delta S_1 + \Delta S_2}{R}\right). \quad (4.71)$$

$\Delta H_1 + \Delta H_2 = \Delta H$ va $\Delta S_1 + \Delta S_2 = \Delta S > 0$ diffuziya vaqtida faollashish energiyasi va entropiyasiga mos keladi. Atomning faollashtirilgan holatga o'tishida bajarilgan izotermik ish panjaraning elastik energiyasiga teng deb tahmin qilsak, entropiya uchun ushbu tenglikdan foydalanish mumkin:

$$-\frac{\partial \Delta G_2}{\partial T} = \Delta S_2 > 0.$$

Boshqa tomondan, ΔS_1 ham musbat bo'lgani uchun

$$\Delta S_1 + \Delta S_2 = \Delta S > 0.$$

Shunday qilib, diffuziya vaqtida faollashtirish entropiyasi doim musbat kattalikga ega degan xulosaga kelish mumkin.

ni baholash uchun quyidagi nisbatdan foydalaniladi :

$$\Delta S = \frac{L\beta\Delta H}{T_{er}}. \quad (4.72)$$

Bu yerda: T_{er} — suyulish temperaturasi; L — faollashtirish energiyasining panjaraning elastiklik energiyasiga o'tuvchi, ulushini hisobga oluvchi ko'paytirgich; β — doimiy μ siljish modulining temperaturaga bog'liqligiga proporsional:

$$\beta = -\frac{d\left(\frac{\mu}{\mu_o}\right)}{d\left(\frac{T}{T_{er}}\right)}. \quad (4.73)$$

L ko'paytma bir xil tuzilishli turli kristallar uchun deyarli doimiy kattalik; tajriba ma'lumotlari bo'yicha, chegarasi markazlashgan kub panjarali metallar uchun $L=0,55$. Yanada aniq ma'lumotlarga ko'ra $L=0,45$.

4.7. Qattiq suqilma eritmalarda diffuziya

Suqilma qattiq eritmalarda erigan atomlar diffuziyasi mexanizmi elementar kristallardagi xususiy atomlar diffuziyasi mexanizmiga o'xshaydi. Erigan atomlar kristallarda panjaraning bo'sh tugunlariga sakrash yo'li bilan, tugunlar oralig'ida panjaraning atomlari orasida to'g'ridan to'g'ri o'rin almashinish yoki halqali mexanizm orqali harakat qilishlari mumkin (4.8-rasm). Erigan atomlar yaqinida kristallning boshqa joylariga nisbatan vakansiya oson hosil bo'lgan hollarda diffuziyalanuvchi atomlar va

vakansiyalardan iborat komplekslarning harakati orqali ham diffuziya amalga oshishi mumkin. Xususiy atomlar diffuziyasidek, bu yerda ham vakansiyalar bo'ylab diffuziya mexanizmi ko'proq uchraydi. Shuning uchun, diffuziya jarayonini tavsiflash uchun (4.62) formuladan foydalanish mumkin, bu yerda ΔH_2 va ΔS_2 — erigan atomning potensial to'siq orqali o'tish vaqtidagi faollanish energiyasi va faolatsiya entropiyasi o'zgarishiga teng. Bunda geterodiffuziya jarayoniga xususiy atomlar diffuziyasi jarayoni ham qo'shilishini e'tiborga olish kerak. Biroq vakansiyalar, erituvchi atomlari bilan almashinishga nisbatan kristall panjarada sustroq bog'lanishga ega bo'lgan o'zga atomlar bilan o'rinlarini osonroq almashinadilar. Shuning uchun geterodiffuziya jarayoni xususiy atomlar diffuziyasidan ustun turadi.

(4.60) formula diffuziyalanuvchi atomlarning ketma-ket o'rin almashinuvi bir-biriga bog'liq emas degan tapminda chiqarilgan. Biroq geterodiffuziya holatida bu shart bajarilmaydi. Tahminlar ko'rsatishicha, geterodiffuziya uchun (4.60) formulaning o'ng tomonini koordinatsion son kattaligi tartibiga teng koeffitsientga ko'paytirish lozim.

4.8. Diffuziyaning mikroskopik nazariyasi

Diffuziyaning mikroskopik nazariyasi diffuzion parametrlarning fizik xossalarini yanada chuqurroq ochish, Fik tenglamalarning qo'llanishi chegaralarini aniqlash imkonini yaratdi.

Biz diffuziyaning mikroskopik nazariyasi asoslarini tuzilishi olmos panjara tuzilishiga o'xshash germaniy va kremniy misolida ko'rsatilgan nazariy asoslarini izohlaymiz.

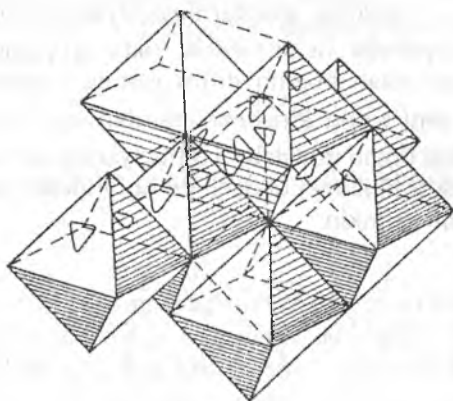
Olmos panjara ikki chegarasi markazlashgan bo'shliq diagonali bo'ylab panjara doimiysining 1/4 qismiga teng masofaga qadar siljigan kub panjaradan iborat. Har bir atom tetraedr cho'qqilarida joylashgan 4 ta

yaqin atomlar bilan bog'langan bog'larning uzunligi $b = \frac{a\sqrt{2}}{2}$, bu yerda a — panjara davri.

Panjarada tugunlar oralig'i bo'shliqlarning ikki xil turi mavjud —

tetraedrik $\left(R_t = \frac{a\sqrt{3}}{8} \right)$ va oktaedrik $\left[R_o = \frac{a\sqrt{3}}{8} \left(\frac{4}{\sqrt{3}} - 1 \right) \right]$, ular tetraedrik va

oktaedrik simmetriyalarda atomlar bilan o'ralgan. Shunday qilib, olmos panjarasini sxematik tarzda bo'sh va atomlar to'ldirilgan tetraedr va oktaedr ko'rinishida tasvirlash mumkin; har bir oktaedr 4 ta to'ldirilgan va 4 ta bo'sh tetraedrlar bilan o'ralgan, har bir bo'sh tetraedr esa — 4 ta oktaedr bilan o'ralgan (4.8-rasm).



4.8-rasm. Tetraedr va oktaedrlardan yasalgan olmos panjarasi.
Shtrixlangan tetraedrlar to'ldirilgan, qolganlari bo'sh.

Bu panjaradagi atomlar harakati vakansiyalar bo'ylab va tugunlar oraliqlari bo'ylab, umumiy holda vakansiyalar va tugunlar oralig'i bo'ylab bir vaqtning o'zida amalga oshadi. Bunda atomlar tugunlardan tetraedrik tugunlar oralig'iga o'tishi va qaytib tugunlarga o'tib, u yerdagi vakansiyalar bilan rekombinatsiyalanishi mumkin. Shuningdek, bir tugunlar oralig'idan ikkinchisiga ham o'tishi mumkin. Aniqki, bunday o'tishlar turli turdagi tugunlar oraliqlari orasida bo'lishi mumkin. Buning natijasida diffuziyaning tugunlararo mexanizmida hisob-kitob uchun 2 ta diffuziya koeffitsientini kiritish lozim.

Bu masalaning matematik tahlili tafsilotiga ko'p e'tibor qilmasdan, biz e'tiborni faqat oxirgi formulalar va ulardan kelib chiqadigan natijalarga qaratamiz.

Vakansiyalar tugunlar va tugunlar oralig'ida joylashgan kirishma atomlari va asosiy modda atomlari bilan joy almashinishi mumkinligi va vakansiyalarning maxsus manbalari yo'qligi, ya'ni vakansiyalar miqdoring ortishi kirishma atomlarining tugunlar oralig'iga o'tishi hisobiga ro'y berishini taxmin qilib, kirishma atomlarining to'liq oqimi uchun quyidagi tenglik olinadi

$$j_N = - \left[\begin{array}{l} D_4 \nabla N_4 + D_{i_2} \nabla N_{i_2} + (D_{v_1} + D_{v_2}) \nabla N_v + D_{g\nu} (C_g \nabla N_v - N_v \nabla C_g) \\ + D_{s_1} (C_g \nabla N_4 - N_4 \nabla C_g) + D_{s_2} (C_g \nabla N_{i_2} - N_{i_2} \nabla C_g) \end{array} \right], \quad (4.74)$$

bunda: N_4, N_{i_2}, N_v — tetraedrik, oktaedrik tugunlar oralig'i va tugunlardagi kirishma atomlarning zichligi, S_g — vakansiyalarning nisbiy zichligi,

$D_h, D_{h_1}, D_{gV}, D_{k_1}, D_{g_2}$ — kirishma atomlarning tetraedrik, oktaedrik tugunlar oralig'ida, vakansiyalarda va tetraedrik, oktaedrik tugunlar oralig'idan vakansiyaga o'tishi bilan bog'liq diffuziyaning ulushiy koeffitsientlari N_h, N_{h_1}, N_v zichliklarni to'liq kirishma atomlarning zichligi N orqali va vakansiyalar zichligi orqali ifodalab va diffuziyaning parsial koeffitsientlari orasidagi bog'liqlikni e'tiborga olib, to'liq oqim uchun ushbu tenglamani quyidagicha yozish mumkin:

$$J_N = - \left[D_V \nabla \frac{2 + C_g \left(\frac{D_{g_1} + D_{g_2}}{D_h + D_{h_1}} \right)}{C_g + D_v \left(\frac{1}{D_h} + \frac{1}{D_{h_1}} \right)} N + C_g \nabla \frac{C_g D_{gV} + D_v \left(\frac{D_{g_1} + D_{g_2}}{D_h + D_{h_1}} \right)}{C_g + D_v \left(\frac{1}{D_h} + \frac{1}{D_{h_1}} \right)} N - \frac{D_{gV} C_g + D_v \left(\frac{D_{g_1} + D_{g_2}}{D_h + D_{h_1}} \right)}{C_g + D_v \left(\frac{1}{D_h} + \frac{1}{D_{h_1}} \right)} N \nabla C_g \right] \quad (4.75)$$

Shunga o'xshash vakansiyalar uchun:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_g \Delta C_g - C_g D_v \Delta \frac{\left(\frac{D_{g_1} + D_{g_2}}{D_h + D_{h_1}} \right)}{C_g + D_v \left(\frac{1}{D_h} + \frac{1}{D_{h_1}} \right)} N \quad (4.76)$$

differensial tenglama olingan.

Diffuziyaning ulushiy koeffitsientlari panjaraning \bar{a} doimiysi va muvozanatning turli holati orasidagi τ relaksatsiya o'tish vaqti bilan bog'liq:

$$D_h = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_h}, \quad D_{h_1} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{h_1}}, \quad (4.77)$$

$$D_{v_{h_1}} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{v_{h_1}}}, \quad D_{v_{h_2}} = \frac{1}{4} \frac{a^2}{\tau_{v_{h_2}}}, \quad (4.78)$$

$$D_{k_1} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{k_1}}, \quad D_{g_2} = \frac{1}{4} \frac{a^2}{\tau_{g_2}}, \quad (4.79)$$

$$D_{gV} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{gV}}, \quad D_{gV} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{gV}}. \quad (4.80)$$

Bu yerda: $\tau_h, \tau_{h_1}, \tau_{v_{h_1}}, \tau_{v_{h_2}}$ — relaksatsiya vaqtlari, kirishma atomlarining tetraedrik va oktaedrik tugunlar oralig'idan, vakansiyalardan tetraedrik va oktaedrik tugunlar oralig'iga o'tishlari; τ_{k_1}, τ_{g_2} — atomlarning vakansiyalar bilan rekombinatsiyalanish vaqti; τ_{gV}, τ_{gV} — vakansiyalarning, boshqa

vakansiyadagi kirishma atomlari bilan va asosiy modda atomlari bilan rekombinatsiyalanish vaqti. Diffuziyaning umumiy koeffitsientlari orasida quyidagi bog'liqlik mavjud:

$$\frac{D_1 D_{1g_1}}{D_{g_1}} = \frac{D_2 D_{1g_2}}{D_{g_2}} \quad (4.81)$$

Xuddi shunday bog'liqlik relaksatsiya vaqtlari orasida ham mavjud

$$\frac{\tau_1 \tau_{1g_1}}{\tau_{g_1}} = \frac{\tau_2 \tau_{1g_2}}{\tau_{g_2}} = \tau_1 \quad (4.82)$$

Turli holatlarda turuvchi atomlar uchun muvozanat τ tartibidagi vaqtlardan keyin (agar diffuziya temperaturasi shundayki, bu vaqtlar 10^{-4} - 10^{-5} s vaqtdan ortmasa) kirishmaning erishiladigan taqsimlanishini kvazi muvozanatiy deb hisoblash mumkin. Va aksincha, $\tau \sim 10^{-2}$ - 10^{-4} s chamasida bo'lgandagi past temperaturada relaksatsiyani e'tiborga olish lozim, diffuziyani e'tiborga olmasa ham bo'ladi.

Bu temperaturalarda qattiq jismlardagi elektrik va mexanik xossalarning relaksatsiyasini o'rganib (kirishma atomlarining bir holatdan ikkinchi holatga o'tishi bilan bog'liq bo'lgan), relaksatsiyaning vaqtlarini va undan kelib chiqqan holda diffuziya koeffitsientlarini ham aniqlash mumkin.

Ikkita qiziqarli holatni ko'rib chiqamiz.

1. Vakansiya zichligi past:

$$C_g \ll \frac{D_1}{D_{1,2}} \quad (4.83)$$

Bu shart bo'yicha, kirishma atomlarining tugunlardagi zichligi tugunlar oralig'idagi kirishma atomlar zichligidan ko'p marta kam, ya'ni $N_D \ll N_{1,2}$.

Bu holda, vakansiya zichligini belgilovchi hadlarni e'tiborga olmagan holda, quyidagi ifodani olamiz:

$$j_N = -2 \left(\frac{D_1 D_{1,2}}{D_1 + D_{1,2}} \right) \nabla N \quad (4.84)$$

Kirishmaning effektiv diffuziya koeffitsienti vazifasini

$$D^* = 2 \frac{D_1 D_{1,2}}{D_1 + D_{1,2}} \quad (4.85)$$

ifoda bajaradi.

2. Vakansiya zichligi yuqori:

$$C_g \gg \frac{D_1}{D_{1,2}} \quad (4.86)$$

Tugunlardagi kirishma atomlari tugunlar oralig'idagidan ortiq.

$$N_u \gg N_{u^*} \quad (4.87)$$

Bu holda:

$$j_N = -D_{gv} (C_g \nabla N - N \nabla C_g) \quad (4.88)$$

Shunday qilib, diffuziyaning vakansion mexanizmi holda diffuziyanuvchi kirishma atomlarining vaqtga bog'liq ravishda zichligining o'zgarishi va vakansiyalarning nisbiy zichligini ifodalovchi differensial tenglamalarni o'zaro bog'liq holda yechish zarur:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_{gv} (C_g \nabla N - N \nabla C_g), \quad (4.89)$$

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_{gv} \nabla C_g. \quad (4.90)$$

$D_{gv} \approx D_{gs}$. Ammo, kirishmaning effektiv diffuziya koeffitsienti vakansiyalarning nisbiy zichligiga mutanosib bo'lganligi tufayli

$$D = D_{gv} C_g \quad (4.91)$$

bo'ladi, u holda $D \ll D_{g0}$, ya'ni vakansiyalar diffuziya koeffitsienti kirishma

atomlar diffuziyasi effektiv koeffitsientidan ancha katta bo'ladi va $\tau \sim \frac{L^2}{D_{gv}}$

vaqt ichida vakansiyalarning muvozanatli taqsimlanishi o'rnatiladi (L — diffuzion soha chuqurligi).

Demak, namuna yuzasida vakansiyalar hosil bo'lishi vaqtida ularning notekis taqsimlanishi kirishma atomlar taqsimlanishiga boshlang'ich vaqtlardagina ta'sir qilishi mumkin.

Vakansiyalar diffuziya koeffitsienti D_{gv} kirishma atomlar diffuziyasi umumiy koeffitsientidan yuqori ekanligini e'tiborga olib, C_g kattalikni uning muvozanatiy C_g^0 miqdoriga almashtirib, (4.85) tenglamani

$$j = -D \nabla N \quad (4.92)$$

ko'rinishda yozish mumkin, bu yerda

$$D = 2D^* \frac{1 + C_g^0 \left(\frac{D_{g1}}{D_1} + \frac{D_{g2}}{D_2} \right) + \frac{D_{gv}}{2D^*} C_g^{02}}{1 + C_g^0 \frac{D^*}{D_1}} \quad (4.93)$$

kirishma atomlar diffuziyasining effektiv koeffitsientini ifodalaydi. D diffuziyaning umumiy koeffitsientlari va vakansiyalarning nisbiy zichligi

funksiyasi ekanligi bois, hamda bu kattaliklar o'zgarishi temperaturaga bog'liq bo'lishligi sababli, kirishma atomlar diffuziyasining D effektiv koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi ham turlicha bo'ladi.

(4.93) formuladan kelib chiqib D ni C_g^o , bo'yicha qatorga yoyib, faqat, chizig'iy xadlar bilan cheklangan holda quyidagi ifodaga ega bo'lamiz:

$$D = 2D^* \left[1 + C_g^o \left(\frac{D_{g_1}}{D_1} + \frac{D_{g_2}}{D_2} - \frac{D^*}{D_1} \right) \right], \quad (4.94)$$

Bundan:

$$\frac{D_{g_1}}{D_1} + \frac{D_{g_2}}{D_2} - \frac{D^*}{D_1} > 0. \quad (4.95)$$

Bu holda vakansiyalar zichligining o'sishi bilan D ortib borishi ko'rinadi. Agar,

$$\frac{D_{g_1}}{D_1} + \frac{D_{g_2}}{D_2} - \frac{D^*}{D_1} < 0 \quad (4.96)$$

bo'lsa, diffuziya koeffitsienti vakansiyalar zichligi ortishi bilan kamayib boradi. (4.95) va (4.96) larni relaksatsiya vaqtlari orqali ifodalab, ko'rish mumkinki, (4.95) formulaning shartlari tugunlar oralig'idagi atomlar yashash vaqti atomlarning tugundan tugunlar oralig'iga o'tish vaqtdan ko'proq ekanligi va vakansiyalar ko'chishi tezligi ortishini bildiradi. Boshqa tomondan, (4.96) bo'yicha, tugundagi atom yashash vaqti tugunlar oralig'idagi vaqtdan ko'ra ko'proq, ya'ni vakansiyalar diffuziyalanuvchi kirishma atomlari uchun qopqon bo'lib xizmat qiladi va diffuziya koeffitsientini kamaytiradi.

Umumiy holda (4.96) shart bajarilganda diffuziya koeffitsienti vakansiya zichligi

$$C_g^o = C_{gm}^o \approx \frac{1}{2} \left(\frac{D^*}{D_{gv}} \right)^2 \left[\frac{D^*}{D_1} - \frac{D_{g_1}}{D_1} - \frac{D_{g_2}}{D_2} \right] \quad (4.97)$$

bo'lganda minimumga ega. Bunda

$$D = D_m \approx 2D^* \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{D^*}{D_{gv}} \right)^2 \left(\frac{D^*}{D_1} - \frac{D_{g_1}}{D_1} - \frac{D_{g_2}}{D_2} \right)^2 \right]. \quad (4.98)$$

Endi, bu hollar kirishma diffuziyasi effektiv koeffitsientining temperaturaga bog'liqligiga qanday ta'sir ko'rsatishini aniqlash qiyin emas. Diffuziya koeffitsientlari va vakansiyalar zichliklari temperaturaga eksponentsial bog'liqligi sababli

$$C_x \sim \exp\left(-\frac{E_s}{kT}\right), \quad D_1 \sim \exp\left(-\frac{E_1}{kT}\right), \quad (4.99)$$

(E_1 — faollashtirish energiyasining mos qiymati) kirishma atomlar diffuziyasi effektiv koeffitsientiga vakansiya xarakterining ta'siri (4.94) formuladagi qavs ichidagi ifoda ishorasiga va faollashtirish partial energiyalari orasidagi

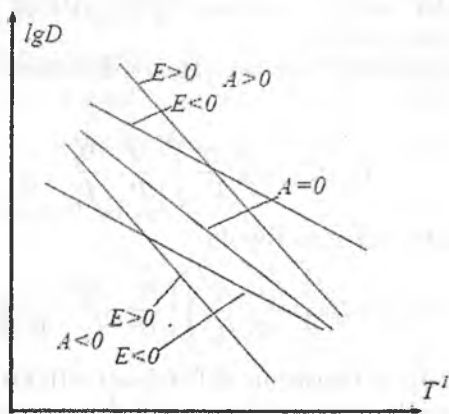
$$D \approx 2D_0^* \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \left[1 + A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)\right] \quad (4.100)$$

munosabatga bog'liq. Bu yerda E — faollashtirishning partial energiyalari orasidagi munosabatga bog'liq holda musbat va manfiy kattalikka ega bo'lishi mumkin.

Tadqiqodlarda diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi odatda Arrenius tenglamasi bilan ifodalanadi:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right). \quad (4.101)$$

Bajarilgan tahlillarning ko'rsatishicha, $A > 0$ va $E < 0$ sharoitida vakansiyalar o'lchanayotgan E_0 faollashtirish energiyasi qiymatining kamayishiga olib keladi, $E > 0$ holatida E_0 va D_0 ortishiga olib keladi. Agar $A < 0$, bo'lsa $E > 0$ bo'lgan holda tajribada o'lchanayotgan E_0 kattaligi ortib boradi, agar $E < 0$ bo'lsa, E_0 va D_0 kamayadi. Ko'rib chiqilgan hollar 4.9-rasmida grafik shaklida ko'rsatilgan.



4.9-rasm. Effektiv diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi.

4.9. Ko'p tarkibli sistemalarda atomlar diffuziyasi termodinamikasi

Avvalgi boblarda bayon etilgan diffuziyaning fenomenologik nazariyasi qattiq jismlarning kristall panjarasidagi atomlarning harakati bilan bog'liq elementar jarayonlar kinetikasiga asoslangan. Ammo ba'zi hollarda murakkab sistemalardagi diffuziyaning ko'rinish jarayonining termodinamik tavsifidan foydalanish qulay.

Diffuziyaning termodinamik shartlarini umumiy holatda ko'rib chiqamiz. Fikning birinchi qonuniga asosan yo'naltirilgan diffuziya ko'chishi, bu sistemada zarralarning zichlik gradienti nol bo'lishi zarur. Diffuziya oqimi nolga teng bo'lganda, grad $N \neq 0$ bo'lishiga qaramay, nolga teng bo'lgan hollarda u sodir bo'lishini tasavvur qilishimiz mumkin. Bundan tashqari, diffuziya konsentratsiya ortishi tomoniga ham yo'nalgan bo'lishi mumkin (chiqib keluvchi diffuziya). Shuning uchun umumiy, ko'rilayotgan sistemada kimyoviy potensial gradiyenti mavjudligi termodinamik shart bo'ladi. μ_1 va μ_2 orqali ixtiyoriy sistemadagi 2 ta nuqtadagi 1 va 2 da kimyoviy potensialni belgilaymiz. Faraz qilaylik $\mu_1 > \mu_2$, bo'lsin, u holda sistemadagi erkin energiya o'zgarishi bir gramm-atom moddaning 1 nuqtadan 2 nuqtaga diffuzion ko'chishi o'zgarishini quyidagi ko'rinishda yozish mumkin:

$$\Delta G = \mu_1 - \mu_2 = \frac{\partial \mu}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2} \dots \quad (4.102)$$

qatorning birinchi hadi bilan chegaralasaq, 1 gramm — atomga ta'sir qiluvchi effektiv diffuzion kuch

$$F_{\text{eff}} = -\frac{\partial \mu}{\partial x} \quad (4.103)$$

bo'ladi.

i -turdagi bir atom hisobga olinganda effektiv diffuzion kuch quyidagicha ifodalanishi mumkin:

$$f_i = -\frac{1}{N_A} \frac{\partial \mu_i}{\partial x}, \quad (4.104)$$

bu yerda: N_A — Avogadro soni, μ_i — i tarkibining kimyoviy potentsiali.

Sistemaning kimyoviy potentsiali umumiy holda temperatura, bosim, shuningdek tashqi parametrlarning funksiyasidir (elektr maydon, mexanik kuchlanish va boshqalar). Ideal eritmalar uchun

$$\mu_i = G_o(T, p) + kT \ln N_i, \quad (4.105)$$

bu yerda: N_i — ko'rilayotgan eritmadagi i - tarkibining molyar ulushi,

$G_o(T, p)$ — toza moddaning molyar erkin energiyasi. Izotermik va izobarik jarayon uchun:

$$G_o(T, p) = const = \mu_{oi} \quad (4.106)$$

Shuning uchun

$$\mu_i = \mu_{oi} + kT \ln N_i. \quad (4.107)$$

Eritmani ideal deb hisoblanmaydigan yuqori konsentratsiya hollarida N_i zichlikni a_i faollik bilan almashtirish kerak, bu holda

$$\mu_i = \mu_{oi} + kT \ln a_i, \quad (4.108)$$

bo'ladi.

Bu yerda keltirilgan munosabatlarni Fikning birinchi qonunini umumiy ko'rinishda keltirib chiqarishda foydalanish mumkin. Masalan, Zayt tavsiya qilgan, diffuziya bir turdagi atomlar ko'chishi bilan bog'langanda ko'rinishda bo'ladi.

Atomning harakatini $f_i = 1$ kuch ta'siri ostida deb faraz qilamiz. U holda diffuziyalanuvchi atomning $\sigma_i, f_i = -\frac{1}{N_i} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial x}$ effektiv diffuzion kuch ta'siri ostidagi o'rtacha tezligi

$$\sigma_i = -\frac{u_i \partial \mu_i}{N_i \partial x}. \quad (4.109)$$

Agar i - tarkib atomlar zichligi N_i ga teng bo'lsa, zarralar oqimini quyidagi ko'rinishda yozamiz:

$$j_i = N_i \cdot \frac{u_i}{N_A} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial x}, \quad (4.110)$$

yoki (4.108) dan foydalanilsa,

$$j_i = N_i \frac{u_i}{N_A} RT \frac{\partial}{\partial x} \ln a_i. \quad (4.111)$$

Aktivlik koeffitsienti $\Upsilon_i = \frac{a_i}{N_i}$ ni kiritsak,

$$j_i = N_i \frac{u_i}{N_A} kT \frac{\partial}{\partial x} (\ln \Upsilon_i + \ln N_i) = N_i \frac{u_i}{N_A} kT \frac{dN_i}{dx} \frac{\partial}{\partial N_i} (\ln \Upsilon_i + \ln N_i) = u_i kT \left(1 + \frac{\partial \ln \Upsilon_i}{\partial \ln N_i} \right) \frac{\partial N_i}{\partial x}.$$

Bu tenglamani Fikning birinchi qonuni bilan taqqoslasak,

$$D_i = u_i kT \left(1 + \frac{\partial \ln \Upsilon_i}{\partial \ln N_i} \right). \quad (4.112)$$

Qavs ichida turgan ifodani diffuziya koeffitsientining termodinamik ko'paytuvchisi deb nomlash mumkin. Ideal eritmalar holda ($\gamma_i = 1$) termodinamik ko'paytuvchi 1 ga teng. Bunda $D = u_i kT = D_i^*$ ko'p tarkibli sistemadagi tarkiblovchianing atomlar diffuziyasi koeffitsientidir. Umumiy holda

$$D_i = D_i^* \left(1 + \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial \ln N_i} \right), \quad (4.113)$$

bu yerda D_i — i - tarkib kimyoviy geterodiffuziya koeffitsienti. Faqat ideal eritma holda ikkala koeffitsient (xususiy atomlar diffuziyasi va geterodiffuziya) o'zaro teng.

Ko'ptarkibli sistemalardagi diffuziyaning o'ziga xos tomoni, sistemaning har bir tarkiblovchisiga xos bo'lgan diffuziyaning partial koeffitsientlari mavjudligidir. Bunda har bir tarkiblovchianing diffuziya koeffitsienti uchun

$$D_1 = D_1^* \left(1 + \frac{\partial \ln \gamma_1}{\partial \ln T_1} \right), \quad D_2 = D_2^* \left(1 + \frac{\partial \ln \gamma_2}{\partial \ln N_2} \right) \quad (4.114)$$

ifodalar o'rinli. Gibbs — Dyugem munosabatiga asosan, sistemada termodinamik ko'paytuvchi.

$$\frac{\partial \ln \gamma_1}{\partial \ln N_1} = \frac{\partial \ln \gamma_2}{\partial \ln N_2} \quad (4.115)$$

ga teng. Bu holda geterodiffuziya koeffitsientlardagi farq xususiy atomlar diffuziyasi koeffitsientlardagi D_1^* va D_2^* farq bilan asoslanishi mumkin. Bu xulosa ko'p tarkibli sistemalardagi umumiy diffuziya hollari uchun ham o'rinlidir.

Takrorlash uchun savol va masalalar

1. Panjara doimiysining ta'rifini ayting.
2. Kristallarda kovalent bog'lanish qanday amalga oshadi?
3. Atomlarda tugunlararo diffuziya mexanizmi qanday?
4. Entropiya va entalpiya faollashishi energiyalari nima?
5. Ko'p tarkibli tizimning kimyoviy potentsiali nima?
6. 300K temperaturada hususiy germaniyaning solishtirma qarshiligi aniqlansin. Agar bu na'munaga har bir donor atomiga 10^8 ta germaniy atomi m keladigan qilib qo'yilsa, solishtirma qarshilik qanday bo'ladi?

(Javob: $\rho_1 = 43,2 \Omega \cdot \text{sm}$, $\rho_2 = 3,64 \Omega \cdot \text{sm}$.)

7. Germaniy tarkibida $2 \cdot 10^{14} \text{ sm}^{-3}$ konsentratsiyali fosfor atomlari bor. O'tkazuvchanlik turi qarama-qarshisiga o'zgarishi va solishtirma qarshilik

0,6 $\Omega \cdot \text{sm}$ ga teng bo'lib qolishi uchun namunaga qanday konsentratsiyali galliy atomlari qo'shish kerak? (*Javob*: $N = 5,7 \cdot 10^{15} \text{ sm}^{-3}$.)

8. Agar donorlar konsentratsiyasi $N_d = 2 \cdot 10^{14} \text{ sm}^{-3}$ bo'lsa, n -turli kremniyning 300 K temperaturada solishtirma qarshiligi aniqlansin? (*Javob*: $\rho = 44,7 \Omega \cdot \text{sm}$.)

9. 300 K temperaturada germaniyni solishtirma o'tkazuvchanligi 1 msm/sm bo'lishi uchun qanday konsentratsiyali akseptor atomlari qo'shish kerak? Bunda akseptor atomlari konsentratsiyasining germaniy atomlari konsentratsiyasiga nisbati nimaga teng? (*Javob*: $n = 3,29 \cdot 10^{12} \text{ sm}^{-3}$.)

10. Hususiy germaniy kristalining temperaturasi 300 K. Agar temperatura 1% ga ortsa, o'tkazuvchanlik necha foizga ortadi? (*Javob*: $\sigma_1 / \sigma_2 = 18\%$.)

11. Qanday temperaturada kremniydagi hususiy zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi 300 K temperaturali germaniydagi hususiy zaryad tashuvchilar konsentratsiyasiga teng bo'ladi? (*Javob*: $T_2 = 1430 \text{ K}$.)

5-BOB. YARIMO'TKAZGICHLARDA DIFFUZIYA NAZARIYASINING AYRIM MASALALARI

5.1. Yarimo'tkazgichlarda birikmalar hosil bo'lishining kirishma atomlar diffuziyasiga ta'siri

Oldingi bobda ko'rib chiqilgan qattiq jismlarda xususiy atomlar diffuziyasi va geterodiffuziya nazariyasi diffuziyalanuvchi zarralar elektrik zaryadi va bunday holda ular orasida hosil bo'luvchi o'zaro ta'sirni inobatga olmagan. Biroq, turli kirishmaviy atomlar o'rtasidagi bunday o'zaro ta'sir, shuningdek kirishmaviy atom va kristall panjara nuqsonlari o'rtasidagi o'zaro ta'sir yarimo'tkazgichlarda kirishma atomlar diffuziyasiga ham kuchli ta'sir o'tkazishi mumkin. Ayniqsa, donor va akseptor tabiatli atomlarning bir vaqtdagi diffuziyasi ro'y beradigan, ya'ni diffuziyalanuvchi kirishmaviy atomlarning qarama-qarshi ishorali elektrik zaryadga ega bo'lgan holati qiziqish uyg'otadi. Bunday ionlar orasidagi Kulon o'zaro ta'sir metastabil harakatli tok tashuvchilarning birikmalar hosil bo'lishiga olib kelishi, ular esa o'z navbatida diffuziya tezligining o'zgartirishi va yarimo'tkazgichlarda diffuziyalanuvchi atomlarni sochilishiga olib keladi.

Birikmalarning hosil bo'lishi panjaraning elastik deformatsiyasi natijasida ham yuzaga kelishi mumkin, buning uchun bu deformatsiyani xosil qiluvchi kirishma atomlarning yaqinlashishi va birikmalar hosil qilishi talab qilinadi. Yarimo'tkazgichlarda kirishma atomlar diffuziyasi o'zaro ta'sir va birikma hosil qilish jarayonlari nazariyasi Reys, Fuller, Morin tomonidan ko'rib chiqilgan.

Donor atomlar diffuziyasi ro'y berayotgan kovakli yarimo'tkazgichni ko'rib chiqamiz. N_a — hajm bo'ylab tekis taqsimlangan akseptor tabiatli kirishma atomlar $N_a(x)$ — zichlik x nuqtadagi donorlar zichligi, $P(x)$ — juft-juft bog'langan N_a^b va N_a^b ionlar konsentratsiyasi, erkin donorlar zichligi esa $N_a - P$ bo'ladi. Bu hol uchun Fik qonuni o'rinli deb hisoblab, diffuziyalanuvchi ionlar oqimini quyidagicha yozish mumkin:

$$j = -D_0 \frac{\partial(N_a - P)}{\partial x}, \quad (5.1)$$

D_0 — erkin donorlarning diffuziya koeffitsienti (birikma hosil bo'lmaganda).

Erkin va bog'langan ionlar dinamik muvozanatda deb hisoblab, ta'sirlashuvchi massalar qonunidan foydalanib, $P(x)$ ni N_a va N_a orqali ifodalash mumkin:

$$\frac{P}{(N_a - P)(N_d - P)} = K(T), \quad (5.2)$$

bu yerda $K(T)$ zichlikka bog'liq emas, va u faqat temperaturaning funksiyasidir. Bir qancha o'zgartirishlardan so'ng

$$(N_d - P) = \frac{1}{2} \left[N_d - N_a - \frac{1}{K(T)} \right] + \sqrt{\frac{\left(N_d - N_a + \frac{1}{K(T)} \right)^2}{4}} + \frac{N_d}{K(T)} \quad (5.3)$$

ni olamiz. (5.3) ni (5.1) ga qo'yib quyidagini topamiz:

$$j = -D \frac{\partial N_a}{\partial x}, \quad (5.4)$$

bu yerda,

$$D = \frac{D_a}{2} \left[1 + \frac{\frac{1}{2} \left(N_d - N_a + \frac{1}{K(T)} \right)}{\sqrt{\frac{1}{4} \left(N_d - N_a - \frac{1}{K(T)} \right)^2 + \frac{N_d}{K(T)}}} \right]. \quad (5.5)$$

Shunday qilib, donor va akseptorli kirishmalar orasida birikmalar hosil bo'lish vaqtida diffuziya koeffitsienti — donor va akseptorlarning konsentratsiyasi, shuningdek muvozanat doimiysi bo'lib xizmat qiladi (birikma hosil bo'lishdagi erkin energiyaning funksiyasi).

Ikki xususiy hollarni ko'rib chiqamiz.

1. $N_d = N_a$. u holda (5.5) dan

$$D = \frac{D_a}{2} \left[1 + \frac{\frac{1}{2K(T)}}{\sqrt{\frac{1}{4K^2(T)} + \frac{N_a}{K(T)}}} \right] \quad (5.6)$$

kelib chiqadi. Bu yerdan:

$$N_a - P + \frac{1}{2K(T)} = \sqrt{\frac{1}{4K^2(T)} + \frac{N_a}{K(T)}}. \quad (5.7)$$

(5.7) ning chap tomonini (5.6) ga qo'ysak,

$$D = \frac{D_a}{2} \left[1 + \frac{1}{2(N_a - P)K(T) + 1} \right] \quad (5.8)$$

ni olamiz.

(5.8) dan $K(T)$ ni olib tashlab va (5.2) dan foydalanib, donorlar va akseptorlar diffuziya koeffitsientining birikish darajasi orasidagi quyidagi bog'liqlikka kelamiz:

$$D = \frac{D_0}{2} \left(1 + \frac{N_a - P}{N_a + P} \right). \quad (5.9)$$

Yuqori darajadagi birikishda, $P \approx N_a$ bo'lganda

$$D = \frac{D_0}{2}. \quad (5.10)$$

2. $N_d \ll N_a$. Bu holda, (5.5) dagi N_d ni N_a ga nisbatan hisobga olmasak,

$$D = \frac{D_0}{1 + K(T)N_a}. \quad (5.11)$$

$K(T) N_a$ yuqori assotsiatsiya vaqtida ko'riyatgan sathda katta qiymatga ega bo'lgani uchun, bu D ning keskin kamayishiga olib keladi.

Yarimo'tkazgichlardagi atomlar diffuziyasiga birikma hosil bo'lishining ta'siri V.Vaskin ishlarida ham ko'rib chiqilgan. U tomonidan, ikki xil kirishma atomlari uchun diffuziya tenglamasining taqribiy yechimi ba'zi chegaraviy shartlar uchun, shuningdek kuchli birikma hosil qilish holi uchun ham topilgan ($K=0$). Bu yechimlar atomlarning konsentratsion taqsimlanishi uchun quyidagi analitik ifodalarga olib keldi (birikmalar diffuziya koeffitsienti alohida tarkiblovchi diffuziya koeffitsientlariga nisbatan kichik deb faraz qilinganda).

1. A — kirishmaning N_{AO} doimiy manbadan B yarimo'tkazgichga diffuziyasi, B kirishma bilan bir N_{BO} turda legirlangan sathgacha (kirishmaviy bug'lanish yo'qligida). Kuchsiz birikma hosil bo'lishi holida

$$N_A N_{AO} \left(1 + \frac{N_{BO}}{K(T)} \right) \operatorname{erfc} \frac{\lambda}{\sqrt{1 + \frac{N_{BO}}{K(T)}}}, \quad (5.12)$$

bu yerda: $\lambda = \frac{x}{2\sqrt{D_A t}}$,

$$N_B = N_{BO} \left[1 - \frac{N_{AO}}{K} \left(\frac{d}{d^2 - 1} \operatorname{erfc} \lambda d - \frac{1}{d^2 - 1} \operatorname{erfc} \lambda \right) \right], \quad (5.13)$$

bunda, $d^2 = \frac{D_A}{D_B}$. 5.1-rasmda yechimning ko'rinishi tasvirlangan.

Shunday qilib, birikma hosil qilish A kirishma eruvchanligini oshiradi va uning diffuziya koeffitsientini kamaytiradi. Shu bilan bir vaqtda chegarada B kirishma zichligi ortadi, $N_B(0) = N_{BO} \left(1 + \frac{N_{AO}}{K(d+1)} \right)$ va λ_0 nuqtada B kirishma taqsimlanishining d bilan bog'liq holda eng past zichligi hosil bo'ladi,

$$\lambda_0^2 = \frac{2 \ln d}{d^2 - 1}. \quad (5.14)$$

2. Doimiy N_{AO} , N_{BO} manbalardan A va B kirishmalarni bir vaqtda diffuziyalari $d=1$ holda

$$N_A = N_{AO} \left[1 + \frac{N_{BO}}{K} \left(\operatorname{erfc}^2 \lambda - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \lambda \exp(-\lambda^2) \operatorname{erfc} \lambda - \frac{2}{\pi} \exp(-2\lambda^2) + \frac{2}{\pi} \operatorname{erfc} \lambda \right) \right], \quad (5.15)$$

$$N_B = N_{BO} \left[1 + \frac{N_{AO}}{K} \left(\operatorname{erfc}^2 \lambda - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \lambda \exp(-\lambda^2) \operatorname{erfc} \lambda - \frac{2}{\pi} \exp(-2\lambda^2) + \frac{2}{\pi} \operatorname{erfc} \lambda \right) \right], \quad (5.16)$$

$d \ll 1$ holda

$$N_A = \frac{N_{BO} N_{AO}}{K} \left[\left(1 - \frac{4d}{3\pi} \right) \operatorname{erfc} \lambda - \frac{3\lambda}{\sqrt{\pi}} \exp(-\lambda^2) + \frac{4d}{3\pi} (\lambda^2 + 1) \exp(-\lambda^2) \right], \quad (5.17)$$

$$N_B = \frac{N_{BO} N_{AO}}{K} \left[\left(1 - \frac{2\lambda d}{\sqrt{\pi}} + d^2 \right) \operatorname{erfc} \lambda - d^2 \operatorname{erfc} \lambda d \right]. \quad (5.18)$$

3. Kuchli birikma hosil bo'lishning chegaraviy holati (bitta kirishma birikma bilan deyarli, to'liq bog'langan). Kirishma A ning doimiy manba N_{AO} dan N_{BO} darajada B kirishma bilan legirlangan yarimo'tkazgichga diffuziyalanishida va uning bug'lanishi yo'qligida

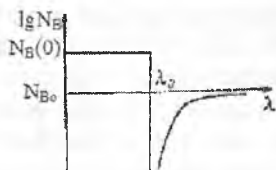
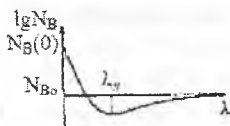
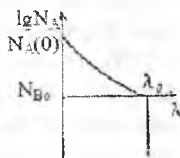
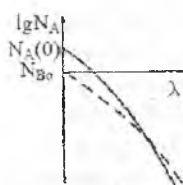
$$N_A = N_{B1} + N_{AO} \left(1 - \frac{\operatorname{erfc} \lambda}{\operatorname{erfc} \lambda_0} \right) \lambda < \lambda_0, \quad N_A = 0 \quad \lambda > \lambda_0, \quad (5.19)$$

$$N_V = N_{V1} \quad \lambda < \lambda_0, \quad N_B = N_{BO} \left(1 - \frac{\operatorname{erfc} \lambda d}{\operatorname{erfc} \lambda_0 d} \right) \quad \lambda > \lambda_0, \quad (5.20)$$

bu yerda

$$N_{B1} = \frac{N_{BO} \exp(-\lambda_0^2 d^2)}{\sqrt{\pi} \lambda_0 \operatorname{erfc} \lambda_0 d}, \quad \frac{\exp[-\lambda_0^2 (d^2 - 1)] \operatorname{erfc} \lambda}{\operatorname{erfc} \lambda_0 d} = \frac{N_{AO}}{N_{BO}}.$$

(5.19) va ((5.20) larning sifat jihatdan ko'rinishi 5.2-rasmda ko'rsatilgan.



5.1-rasm. Kuchsiz birikma hosil bo'lganda A va B kirishmalar taqsimoti.

5.2-rasm. Kuchli birikma hosil bo'lganda A va B kirishmalar taqsimoti.

Kuchsiz birikma hosil qilish holatidagidek, bu yerda ham A kirishmaning sirtiy zichligining ortishi birikma zichligi kattaligining ortishi bilan kuzatiladi. Shu bilan bir vaqtda B kirishmaning chegaraviy zichligining ortishi birikma hosil bo'lishi sohasiga o'tishi hisobiga ro'y beradi. Biroq, sust birikma hosil bo'lish holatida A kirishmaning konsentratsion taqsimlanish profil keskinligi ortishi va B kirishmaning konsentratsion taqsimlanishida minimum kuzatilsa, kuchli birikma hosil bo'lishida, $K=0$ da, konsentratsion taqsimot A kirishmaning λ_0 nuqtada keskin uzilishi, B kirishmaning konsentratsion taqsimoti uchun ham ro'y beradi.

Shunday qilib, birikma hosil bo'lish mavjudligida diffuziya tenglamasining yechimini matematik taxlilining ko'rsatishicha, birikma hosil bo'lishi, birinchidan, birikma hosil bo'lish sohasida kirishmaning umumiy zichligining ortishiga va yondosh sohada uning zichligi pasayishiga olib kelsa, ikkinchidan, kirishmaning diffuzion taqsimlanishining ko'rinishini o'zgartiradi. Kirishmalardan birining bir tekis taqsimlanishida birikma hosil bo'lishi shu kirishmaning konsentratsion taqsimlanishida uning doimiysi va ikkala kirishmaning diffuziya koeffitsientlari nisbatiga bog'liq bo'lgan minimumni paydo bo'lishiga olib keladi,

Yarimo'tkazgichlardagi diffuziyaga birikmalar hosil bo'lishining ta'siri kirishma zichligi yuqori darajada bo'lgan hollarda va birikma hosil qilish energiyasining yuqori qiymatlari, ayniqsa, katta ahamiyatga ega, $N_{AB} \gg K$ holda qilingan hisoblarni ko'rsatishicha, birikma hosil qilish sezilarli bo'lishi uchun temperatura 1000 K dan yuqori bo'lishi zarurdir. Kirishma zichligi 10^{-4} - 10^{-2} da birikma hosil qilish energiyasi 0,4 — 1 eV tartibida bo'lishi kerak.

Yuqorida aytib o‘tilganidek, birikma hosil bo‘lishini e‘tiborga olgan holda diffuzion tenglamani yechishda, birikmalarning diffuziya koeffitsienti erkin kirishma atomlar diffuziya koeffitsientiga nisbatan kichik, shuning uchun birikmalar diffuziyasi e‘tiborga olinmagan. Biroq, birikmaning diffuziya koeffitsienti erkin kirishma atomlar diffuziya koeffitsientidan yuqori bo‘lgan hollar ham bo‘lishi mumkin. Bunday holat diffuziyaning vakansion mexanizmida ro‘y berishi mumkin, ya‘ni diffuziyalanuvchi kirishma va vakansiya birikmai elektrostatik o‘zaro ta‘sir natijasida hosil bo‘lgan hol. Bunday birikma hosil qilish vakansiyalarni diffuziyalanuvchi kirishma atomlariga «torta» (vakansiyaning atom yaqinida turish ehtimolini ko‘paytiradi) va demak, kirishma atomining diffuziya koeffitsienti ortishiga va vakansiyalar orasida birikmalar hosil bo‘lishiga (divakansiya, trivakansiya) olib keladi. Bunda vakansiyalarning diffuziya koeffitsienti potensial to‘siq kamayishi natijasida ortadi va ularning siljish ehtimoli ham ortadi.

5.2. Ichki elektr maydonlarining diffuziyaga ta‘siri

Yarimo‘tkazgichlarda kirishma ionlar diffuziyasiga ularda mahalliy elektrostatik diffuzion potentsiallar tufayli hosil bo‘ladigan elektr maydonda ionlar dreyfi ham qo‘shiladi. Bunday elektr maydon, masalan, elektron-kovakli o‘tishlarda, shuningdek kirishma ionlarining notekis taqsimlagan joylarida mavjud bo‘ladi.

Ichki elektr maydonning diffuziyaga ta‘sirini hisobga olish zaruriyati birinchi marta Bardin, Brattayn va Shokli tomonidan aytilgan. Keyinchalik, Resys, Fuller va Morin, shuningdek, Smit tomonidan bu g‘oyani germaniy va kremniydagi kirishma diffuziyasiga qo‘llash taklifi rivojlantirilgan.

Ichki elektr maydon sodda holda kirishmaning bir jinsli yarimo‘tkazgichga diffuziyalanishi jarayonining o‘zidayoq yuzaga keladi. Bu maydonning yuzaga kelish sababi diffuziyaning ambipolyarlik xossasi va harakatlanayotgan ionlar hamda shu tufayli hosil bo‘lgan tok tashuvchilar (elektronlar va kovaklar). orasidagi diffuziya koeffitsientlarining farqidir. Tok tashuvchi zarrachalar diffuziyalanuvchi ionlarga nisbatan kattaroq diffuziya koeffitsientiga va qarama-qarshi ishorali elektr zaryadiga ega, shuning uchun ular o‘z harakatlarida ionlardan ilgari ketadilar. Bu esa, ionlar harakatini tezlashtiruvchi va tok tashuvchilar xarakatini sekinlashtiruvchi elektr maydonini yuzaga keltiradi.

Maydon kuchlanganligi E ikki oqim tengligi shartidan kelib chiqqan holda topilishi mumkin, masalan, j_a akseptor ionlar oqimi va kovaklar oqimi j_c ,

$$j_a = -D_a \left(\frac{\partial N_a}{\partial x} + \frac{N_a e E}{kT} \right), \quad (5.21)$$

$$j_p = -D_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{peE}{kT} \right). \quad (5.22)$$

Bu yerda: D_a , D_p , N_a , p — mos ravishda akseptor ionlar va kovaklarning diffuziya koeffitsientlari va akseptor ionlar va kovaklar zichligi; e — elektron zaryadi.

Neytrallik shartidan $p = N_a + n$ va $np = n_i^2$ munosabatni hisobga olib (n_i — xususiy zaryad tashuvchilar zichligi) kuchlanganlikning o'rtacha qiymati uchun quyidagi ifodani olamiz.

$$\bar{E} = \frac{kT}{eN_a} \frac{\partial N_a}{\partial x}. \quad (5.23)$$

(5.23) ni (5.21) ga qo'yib

$$j_a = -D_a^* \frac{\partial N_a}{\partial x} \text{ ni olamiz,} \quad (5.24)$$

bu yerda $D_a^* = 2D_a$. D_a^* — effektiv diffuziya koeffitsienti, D_a — zichlik gradienti yo'qligida kirishmaning diffuzion siljishini bildiruvchi xarakterli diffuziya koeffitsienti (masalan, izokonsentratsion diffuziyada)

Zaromb nisbatan umumiy masalani ko'rib chiqdi. Bunda gradientli elektr maydon boshlang'ich materialda boshqa kirishmaning notekis taqsimlanishi natijasida yoki donor va akseptor tabiatli kirishma atomning bir vaqtdagi diffuziyasi ro'y bergan hollarda yuzaga keladi: Bu holda

$$j_d = -D_d \left(\frac{\partial N_d}{\partial x} + \frac{N_d e E}{kT} \right), \quad (5.25)$$

$$j_a = -D_a \left(\frac{\partial N_a}{\partial x} + \frac{N_a e E}{kT} \right), \quad (5.26)$$

$$j_n = -D_n \left(\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{neE}{kT} \right), \quad (5.27)$$

$$j_p = -D_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{peE}{kT} \right). \quad (5.28)$$

Bu sistemadan elektr tok yo'qligi sharoitida, ya'ni $j_d + j_p = j_a + j_n$ va neytrallik shartini hisobga olib hamda $np = n_i^2$ munosabatni e'tiborga olgan holda, elektr maydon kuchlanganligining o'rtacha qiymatining taqribiy ifodasini olamiz:

$$\bar{E} \approx \frac{kT}{2n_e} \left(\frac{\partial N_d}{\partial x} \pm \frac{\partial N_a}{\partial x} \right). \quad (5.29)$$

Manfiy va musbat ishoralar bir xil va qarama-qarshi yo'naltirilgan akseptorlar va donorlar zichliklari gradiyentlariga mos keladi.

(5.29) ifodadan ko'rinib turibdiki, bir xil yo'naltirilgan akseptorlar va donorlar zichliklari gradiyentlari tufayli hosil bo'lgan maydoni bir turdagi diffuziyalanuvchi kirishma atomlar zichlik gradienti tufayli hosil bo'lgan ichki elektr maydoniga nisbatan kichik va u maydonga nisbatan qarama-qarshi tomonga yo'nalgan bo'lishi mumkin. Bunday maydon diffuziyalanuvchi kirishmaning harakatini sekinlatadi. Aksincha, donor va akseptorlarning qarama-qarshi yo'nalgan gradiyentlaridan hosil bo'lgan elektrik maydon, hamisha bitta diffuziyalanuvchi kirishma gradientidan hosil bo'lgan elektrik maydondan katta bo'ladi va shuning uchun u diffuziyani tezlatadi. n_i ning ortishi natijasida temperatura ko'tarilishi bilan elektr maydon kamayib boradi, $n_i \gg N_d$ va $n_i \gg N_a$ bo'lganda u yo'qoladi.

(5.29) formuladagi \bar{E} ifodaning (5.25) va (5.26) ga qo'yib,

$$j_a = -D_d^* \frac{\partial N_d}{\partial x}, \quad (5.30)$$

$$j_a = -D_a^* \frac{\partial N_a}{\partial x} \quad (5.31)$$

ifodalarni olamiz. Bu yerda

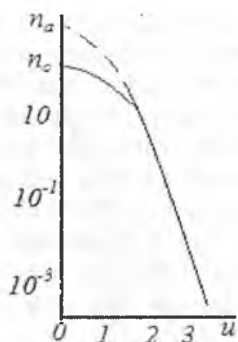
$$D_d^* = D_d \left[\left(1 + \frac{N_d}{2n_i} \right) \pm \frac{N_d}{2n_i} \frac{\partial N_d}{\partial x} / \frac{\partial N_d}{\partial x} \right], \quad (5.32)$$

$$D_a^* = D_a \left[\left(1 + \frac{N_a}{2n_i} \right) \pm \frac{N_a}{2n_i} \frac{\partial N_a}{\partial x} / \frac{\partial N_a}{\partial x} \right]. \quad (5.33)$$

D_d^* va D_a^* mos ravishda, diffuziyaning effektiv koeffitsientlari bo'lib, bir jinsli bo'lmagan yarimo'tkazgichlarda gradiyentli ionlangan elektr maydonlar mavjudligida ion, donor va akseptorlar diffuziyalanadi.

Effektiv diffuziya koeffitsientlari D_d^* va D_a^* diffuziyalanuvchi kirishma atomlar zichligiga, kirishma atomlar zichlik gradiyentlari nisbatlariga, shuningdek xususiy zaryad tashuvchilar zichligiga bog'liq. Temperatura ortishi bilan, n_i keskin o'sganda va $E \rightarrow 0$ bo'lganda, D_d^* va D_a^* lar D_d va D_a qiymatlari bir jinsli yarimo'tkazgichlardagi donor va akseptorlarning diffuziya koeffitsientlariga yaqinlashadi.

Dastlabki ishlarda bajarilgan gradiyentli elektr maydonlarining diffuziyaga bo'lgan ta'sirini tahlili asosan sifat xarakteriga ega va qurilgan maydon mavjudligida yuzaga keluvchi konsentratsion taqsimlanishni



5.3-rasm. Konsentratsion egri chiziqlar. Shtrix chiziq — erfç funksiya, uzluksiz chiziq — ichki elektr maydonini hisobga olingandagi taqsimot.

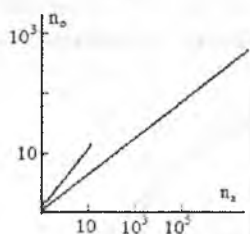
miqdor jihatdan bayon etish imkonini bermaydi. Lexovek va Slobodskiy xususiy yarimo'tkazgichga kirishma diffuzion tenglamasi yechimini topdilar. Uu holda diffuzion tenglama quyidagi ko'rinishga keltiriladi:

$$n + (n^2 + 4)^{1/2} + k_1 = k_2 \int du \exp \left\{ - \int \frac{2udu}{1+F} \right\}, \quad (5.34)$$

bu yerda

$$n = \frac{N_0}{n_1}, \quad u = \frac{x}{(2Dt)^{1/2}}, \quad F = \frac{n}{(n^2 + 4)^{1/2}},$$

k_1 va k_2 — chegaraviy shartlardan aniqlanuvchi integrallash doimiylari.



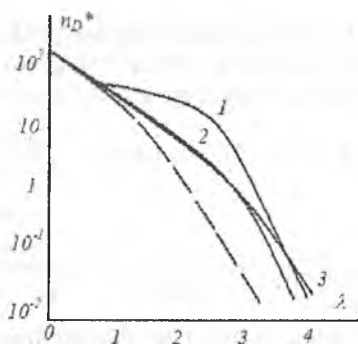
5.4-rasm. n_0 ning n_1 ga bog'liqligi. Shtrix chiziq — maydon bo'lmagan hol uchun.

(5.34) tenglama yechimining turli qiymatlari uchun 0,5 dan 3,0 gacha intervalda bajarildi. 5.3-rasmda konsentratsiya taqsimoti $u=2$ bo'lgandagi holat ko'rsatilgan. Ko'rinib turibdiki, erfç funksiya zichlikning haqiqiy ko'rinishi $n \ll 1$ intervalda mos keladi, erfç funksiya orqali ifodalangan

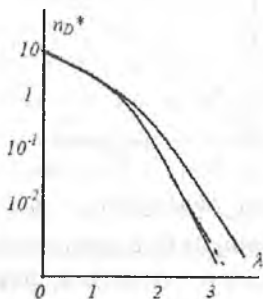
konsentratsion taqsimotni $u=0$ qiymatga ekstrapolyatsiya qilib (ya'ni chegara sirtiga $x=0$)da olib, 5.4-rasmda grafik shaklda ko'rsatilgan «ehtimoliy S sirtiy zichlik n_n ni aniqlash mumkin.

Shou va Uells ishlarida donorlarning akseptorlar bilan bir jinsli legirlangan yarimo'tkazgichdagi diffuziyasi ko'rib chiqilgan. Diffuzion tenglamani taqriban integrallash EHMda amalga oshirilgan. 5.5- va 5.6-rasmlarda olingan konsentratsion taqsimotlarning ba'zi birlari ko'rsatilgan.

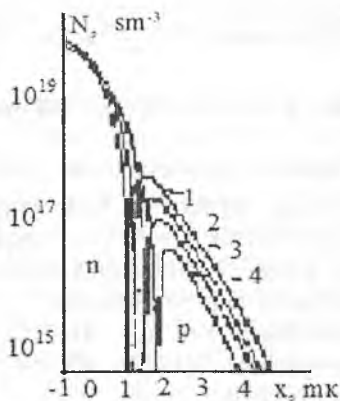
Kleyn va Bil ishlarida EHM yordamida qarama-qarshi ishorali kirishmalarning bir vaqtdagi diffuziyalarini ifodalovchi tenglamalar sistemasi integrali hisoblangan. n_n ning turli qiymatlari uchun olingan natijalari 5.7-rasmda keltirilgan. Bu rasmdan ko'rinib turibdiki, N_D/n_n qiymatlarining o'sishi bilan ichki elektr maydonning diffuziyalanuvchi kirishma atomlarga ta'siri keskin ortadi.



5.5-rasm. $n_{D0}=100$, $p_A=10(1)$ va $1(2)$ uchun donorlarning taqsimoti.
3 — $\operatorname{erfc} \lambda\sqrt{2}$ — funksiyasi. Uzluksiz chiziq — (3) bo'yicha.



5.6-rasm. $n_{D0}=10$ va $p_A=1(1)$ uchun donorlarning taqsimoti
va $\operatorname{erfc} \lambda\sqrt{2}$ — funksiyasi (2).



5.7-rasm. Kompensirlanmagan kirishmalar taqsimoti.

V.V.Vaskin ishlarida to'liq va uzviy ravishda diffuzion tenglamalar sistemasi va Puasson tenglamasini birga yechish asosida diffuziyaga ichki elektr maydonlarning ta'siri ko'rsatilgan.

Turlicha usullar bilan (o'rta maydon usuli, EHM dagi sonli usul, variatsion usullar) bir tarkibli diffuziya uchun turlicha chegaraviy sharoitda diffuziya tenglamasining taqribiy yechimlari olingan, shuningdek ikki kirishmaning bir vaqtda va ketma-ket diffuziyasi uchun diffuziya tenglamasi analitik yechimining sonli yaqinlashuvi olingan.

5.3. Bir tarkibli diffuziya

Qo'zg'otilmagan xususiy yarimo'tkazgichga bir tarkibli diffuziya qilinishi xoli uchun diffuzion tenglama quyidagicha yoziladi:

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \text{div}(\nabla n + zn\nabla\varphi), \quad (5.35)$$

bu yerda:

$$\nabla\varphi = \frac{z\nabla n}{\sqrt{z^2n^2 + 4}}.$$

Bunda to'la oqim uchun quyidagicha ifoda hosil bo'ladi:

$$j = -\left(1 + \frac{nz^2}{\sqrt{n^2z^2 + 4}}\right)\nabla n. \quad (5.36)$$

Bu yerda: $n = \frac{N}{n_0}$, N — kirishma atomlar zichligi, z — uning zaryadi

(elektron zaryadi birligida), $\tau = Dt$, $\varphi = \frac{1}{4}e\varphi_0$, φ_0 – ichki maydon potentsiali

Bu holda (5.36) dan ko‘rinib turibdiki, diffuzion oqim, $1 + \frac{nz^2}{\sqrt{z^2 n^2 + 4}}$ marta ortadi. Bunda oqim $(1+z)$ martadan ortiq ko‘paya olmaydi (ya‘ni maydon to‘yinishga intiladi). Bu esa katta konsentratsiyali sohalarda ($n > 1$) kirishma atomlar kichik zichlik ($n \ll 1$) sohalariga qaraganda tezroq diffuziyalanishiga olib keladi, xuddi shu konsentratsion taqsimlanish bog‘lanishi keskinligi ortishini keltirib chiqaradi.

Kirishma atomlarning bir tur atomlar bilan legirlangan yarimo‘tkazgichga diffuziyalanish holatida, diffuzion oqim uchun tenglamani quyidagi ko‘rinishga ega bo‘ladi:

$$j = - \left[1 + \frac{z^2 n}{\sqrt{(zn \pm z_1 p)^2 + 4}} \right] \nabla n, \quad (5.37)$$

bu yerda: z , z_1 zaryadlar, n va p kirishma zichliklari (n , birligida). Agar z va z_1 bir ishorali bo‘lsa, xususiy yarimo‘tkazgichga kirishma atomlar diffuziyasiga o‘xshash holat bo‘ladi. O‘sha ishorali kirishma bilan oldindan legirlangan faqat elektr maydonning kamayishiga, ya‘ni oqim kamayishiga olib keladi.

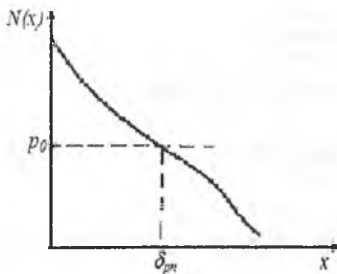
Agar z va z_1 qarama-qarshi ishorali bo‘lsa $p-n$ o‘tish yuzaga keladi ya‘ni $zn + z_1 p = 0$ bo‘ladi, bu joyda maydon maksimumga yetadi

$$E_{p-n} \approx -\frac{z}{2} \nabla n, \quad (5.38)$$

oqim bu joyda

$$j \approx -\frac{n_0 z^2}{2} \nabla n, \quad (5.39)$$

qo‘shni sohadagi gradiyentli oqimni ancha oshiradi.

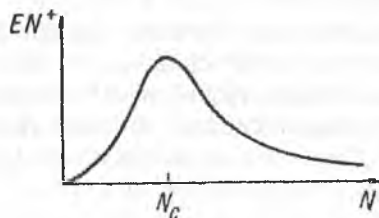


5.8-rasm.
*p-n o‘tish mavjudligida
n – kirishmalarning taqsimoti.*

Bu oqimning ortishi p - n o'tishda kirishma zichlik gradiyentining kamayishiga olib keladi va yetarli darajada yuqori zichlikda ($p \gg 1$), p - n o'tish sohasida kirishma atom taqsimlanishida pog'ona paydo bo'lishi mumkin (5.8-rasm).

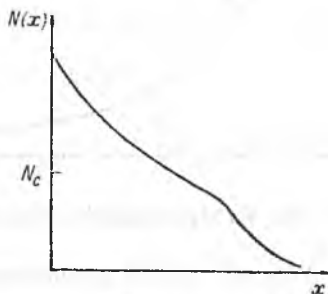
Shunday qilib, qilingan taxlillar ko'rsatadiki, diffuziyalanuvchi kirishma atom konsentratsion taqsimotini o'zgartirilsa, dreyfli oqim (ichki maydon hisobiga) gradiyentli diffuzion oqimdan ancha ustun bo'ladi.

To'la ionlashmagan uyg'ongan yarimo'tkazgichlarda kirishma atomlar dreyf oqimi gradient oqimidan ancha kichik bo'ladi. Diffuziyalangan kirishma atomlar zichligining kamayishi bilan (ionlangan kirishma atomlar miqdori ortgani sababli) maydon oqimi o'sadi, u esa umumiy oqim ortishiga olib keladi. Biroq, ichki maydon quvvati kuchlanganlik kamayishi bois zichlikning yanada kamayishida- elektr maydon oqimi kamayishni boshlaydi). Shunday qilib, ichki maydon oqimining diffuziyalanuvchi atomlar zichligiga bog'liqligi maksimumli egri chiziq ko'rinishiga ega bo'ladi (5.9-rasm).



5.9-rasm. Maydon oqimining kirishma konsentratsiyasiga bog'liqligi.
 N_c – valent sohadagi kovaklarning holatlari zichligi.

Konsentratsion taqsimotda bu holat pog'onalarining paydo bo'lishiga olib keladi (5.10-rasm).

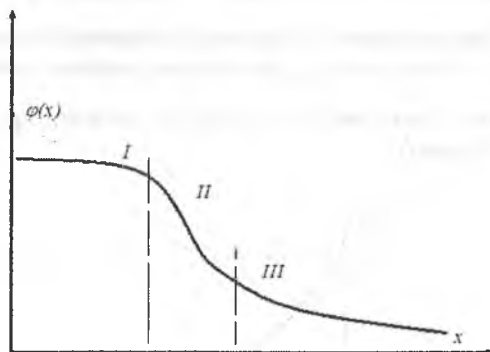


5.10-rasm. Uyg'onish mavjudligida kirishma atomlari taqsimoti.

5.4. Ko'p tarkibli diffuziya

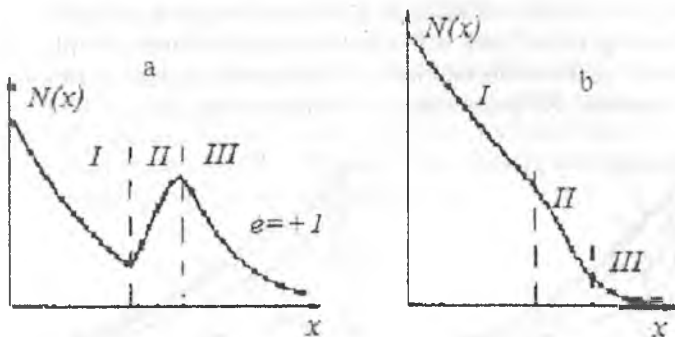
Ko'p tarkibli diffuziya holida kirishmaning maydon oqimi faqatgina ichki elektr maydonining gradiyentiga emas, balki, boshqa kirishma atomlar gradiyentlariga ham bog'liq. Bunda sekin diffuziyalanadigan kirishma atomlari kristallning kam konsentratsiyali sohasida joylashishi mumkin, sekin diffuziyalanuvchi kirishma atomlarning ma'lum bir joyga to'planishi, kristallning bu sohasida ichki elektr maydoni oqimi kirishma atomlar gradiyenti oqimidan ortib ketishiga olib kelishi mumkin va u diffuziyalanuvchi kirishma atomlar gradiyenti bo'ylab va qarama-qarshi ham yo'nalgan bo'lishi mumkin. Butun kristall bo'ylab diffuzion oqimning uzluksizligi sharti bajarilishi lozimligi sababli, mahalliy elektr maydoni mavjudligi bu sohada diffuziyalanuvchi kirishma atomlar miqdorining o'zgarishiga olib keladi.

Faraz qilaylik, (5.11-rasm) II sohada sekin diffuziyalanuvchi kirishma atomlar zichlik gradienti hosil qilgan kuchli ichki maydon bor. Ichki maydon yo'nalishi ko'rilyotgan kirishma atomlar diffuziyasi yo'nalishi bilan mos keladigan holni ko'rib chiqamiz. Bunda II sohada kirishma atomlari oqimi asosan maydon bilan I va III sohalarda - diffuzion oqim bilan aniqlanadi II sohadan kirishma atomlari oqimi atomlar zichligi gradiyenti hisobiga bo'lgani uchun oqimning uzluksizligi hisobiga II va III sohalarda chegarasida atomlar zichligi ortishi lozim.



5.11-rasm. $\varphi(x)$ potensialning taqsimoti.

Boshqa tomondan, I sohada zichlik gradientining ortishi, II sohaga kirishma oqimi kattaligi bilan belgilanadi, o'z navbatida I va II soha chegarasida zichlik kamayishi lozim (5.12-a rasm).



5.12-rasm. II sohada kuchli maydon mavjudligida kirishma atomlari taqsimotining sifatiiy xarakteri.

a — maydon yo'nalishi diffuziya yo'nalishi bilan bir xil, b — teskari yo'nalishda.

Yuqorida bayon qilingan tahlillar asosida quyidagi xulosaga kelish mumkin: ichki maydon yo'nalishi diffuziya yo'nalishiga qarama-qarshi bo'lgan — (5.12-b rasm) da rasmda ko'rsatilgan tarzda berilgan atomlar zichligi taqsimoti yuzaga keladi. Bunda zichliklarning sohalar chegarasidagi o'zgaruvchanligi teskari bo'ladi:

$$n_{I,II} > n_{II,III}$$

V.V. Vaskin ishida ikki kirishmaning bir vaqtdagi yoki ketma-ket diffuziyasi hollari uchun masalaning analitik va sonli echimi berilgan. Matematik hisob-kitoblar juda murakkabligi bois, biz faqat olingan natijalarning sifat bayoni va grafiklar tasviri bilan chegaralanamiz. Oldin, $D_1 \gg D_2$ bo'lganda turlicha D_1 va D_2 diffuziya koeffitsientiga ega bo'lgan ikki xil kirishmaning bir vaqtdagi diffuziyasining miqdoriy va analitik

echimini keltiramiz. Boltsman soni $\lambda = \frac{x}{2\sqrt{D_1 t}}$ bo'lganda diffuziya tenglamasi quyidagicha yoziladi:

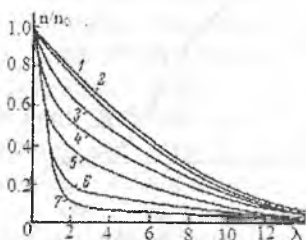
$$\frac{d^2 n}{d\lambda^2} + 2\lambda d^2 \frac{dn}{d\lambda} + \frac{d}{d\lambda} \left(n \frac{d\varphi}{d\lambda} \right) = 0, \quad (5.40)$$

bu yerda

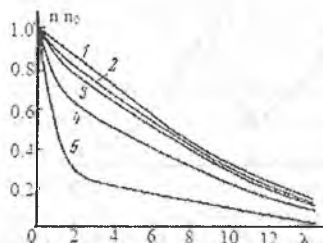
$$n = \frac{N_i}{n_i}, \quad \varphi = \frac{1}{4} e\varphi_0, \quad d^2 = \frac{D_1}{D_2}$$

Kirishmalar atomlari bir marta ionlashgan deb olinadi. 5.13-5.14-rasmlarda diffuziyalanuvchi ionlar bir xil yoki turlicha zaryadga va turlicha chegaraviy

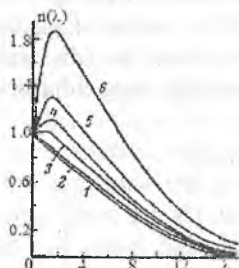
zichliklarga ega bo'lgandagi diffuzion tenglamaning miqdoriy yechimi natijalari keltirilgan. Kutilganidek, tez diffuziyalanuvchi kirishma atomlari sekin diffuziyalanuvchi kirishma atomlarining zichligining taqsimlanishi xarakteriga kam ta'sir ko'rsatadi. Ko'proq teskari ta'sir ahamiyatga ega.



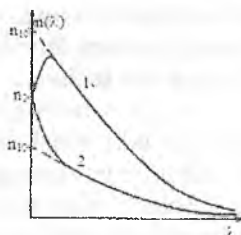
5.13-rasm n va p — kirishmalarning bir vaqttdagi diffuziyasida n -kirishma atomlarining taqsimoti.



5.14-rasm. n va p — kirishmalarning bir vaqttdagi diffuziyasida donor kirishma atomlarining taqsimoti.



5.15-rasm. n va p — kirishmalar bir vaqt diffuziyasida n -kirishma atomlarining konsentratsion egri chiziqlari.



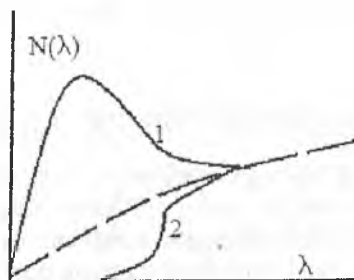
5.16-rasm. $n(x)$ funksiyasi.
1- $e=+1$ (-1), 2- $e=-$ (+1).

Bunda tez diffuziyalanuvchi kirishma atomlari zichliklarining taqsimlanishi ikki sohaga — zichlik keskin o'zgarishi sohasiga (bir xil belgili zaryadlarda o'suvchi va turli belgili zaryadlarda pasayuvchi) va erkin diffuziyaga mos keluvchi sohaga bo'linadi.

5.16-rasmda diffuziyalashuvchi atomlar doimiy manbadan a_0 va b_0 (1-egri chiziq) yarim chegaralangan jismga ikki xil kirishma atomlarining (n va p) bir vaqtda diffuziyasida n uchun diffuzion tenglamaning sifatiy echimi va doimiy manba a_0 dan n -kirishma atomlari diffuziyasi uchun va p -kirishmaning bir xil legirlangan (p_0 -darajagacha) yarimo'tkazgichdan, $x=0$ chegara bog'lovchi bo'lgan (2 egri chiziq) holat ko'rsatilgan. Rasmdan

ko'rinib turibdiki, p -kirishma atomlar gradientidan hosil bo'lgan maydonni hisobga olish n -kirishmaning konsentratsion taqsimlanishi o'zgarishiga olib keladi. Bunda turlicha ishorali kirishmalar ta'sir effekti qarama-qarshi bo'ladi.

5.17-rasmda, kirishma atomlar b_0 doimiy manбайдan p — kirishma atomlari diffuziyasi holati uchun zichlik taqsimotining $n(\lambda)$ sifatiiy xarakteristikasi va bog'lovchi chegarali yarimcheksiz na'munaning asosidan n — kirishmaning bug'lanishi keltirilgan



5.17-rasm. n -kirishmaning bug'lanish holati. 1- $e=-1$, 2- $e=1$.
Shtrix chiziq p -kirishmalar yo'qligida n -kirishmalarning taqsimoti.

Rasmdan ko'rinib turibdiki, chegaraviy shartlarda n va p ionlarining bir xil ishorali zaryadlarida p -kirishma atomlari elektr maydoni n -kirishmani u xarakatlaniyotgan sohadan itarib chiqaradi. Qarama-qarshi belgili zaryadlar holida, p -kirishma hosil qilgan elektr maydoni shu sohada n -kirishma atomlarini to'playdi. Zichliklar taqsimoti kirishmaning yetarlicha yuqori zichliklari n -kirishma atomlari zichligining maksimumi kuzatilishi mumkin.

Endi, ikki xil kirishma atomlarining ketma-ket diffuziyalanishi holi uchun olingan diffuziya tenglamasi echimining natijalarini ko'rib chiqamiz. Bu holda Boltsman usulini emas, differensial tenglamani qo'llashga to'g'ri keladi.

$$d \frac{\partial n}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} + n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad (5.41)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial p}{\partial x} + ep \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad (5.42)$$

$$\varphi = \ln \frac{n + ep_0 + \sqrt{(n + ep_0)^2 + 4}}{2}, \quad (5.43)$$

bu yerda: $\tau = D_p t$, $d^2 = \frac{D_p}{D_n}$: $e - n$ va p tarkiblar zaryadining nisbiy belgisi ($e=1$ — zaryadlar bir xil ishorali bo'lsa, $e=-1$ — turlicha bo'lsa).

Agar, n -kirishma p -kirishma ortidan diffuziyalansa va diffuziya doimiy manbadan ro'y bersa, masalaning chegaraviy va boshlang'ich shartlari quyidagicha bo'ladi:

$$n(o, \tau) = n_o \quad p(o, \tau) = p_o, \quad n(x, o) = o, \quad h(x, o) = p_o f\left(\frac{x}{\sqrt{\tau_o}}\right),$$

$f\left(\frac{x}{\sqrt{\tau_o}}\right)$ — xarakterli singish chuqurligi $x_o \sim \sqrt{\tau_o}$, $x \geq 0$ ega bo'lgan

kirishmaning boshlang'ich taqsimlanishi.

Diffuziyaning turli vaqtlari uchun diffuziya tenglamalarining taqribiy echimining tahlili bir diffuziyalanuvchi kirishmaning boshqasining zichligi taqsimotiga bo'lgan ta'sirini aniqlashga imkon berdi.

$\tau \ll d^2 \tau_o$ bo'lganda kirishma atomlari ichki elektr maydonining n -kirishmaga ta'siri kristall xususiy maydonining ta'siridan ortiqcha bo'lmaydi.

$\tau \gg d^2 \tau_o \frac{n_o^2}{p_o}$ uchun n -kirishma maydoni kristall xususiy maydonida ortiqroq bo'ladi. Shu bilan bir vaqtda, tez diffuziyalanuvchi kirishma xosil qilgan maydonning sekinroq xarakatlanuvchi p -kirishma diffuziyasiga bo'lgan ta'siri barcha vaqtlar uchun ahamiyatli emas.

5.5. Yarimo'tkazgichlarda diffuziyaning vakansiyali mexanizmida Kulon o'zaro ta'sirlashuvi

Yarimo'tkazgichlarda diffuziya ko'pchilik hollarda zarrachalarning kristall panjara vakansiyalari bo'ylab harakatlanishi orqali amalga oshiriladi. Yarimo'tkazgichlarda vakansiyalar asosan zaryadlangan holatlarda bo'lganligi, zaryadlangan vakansiyalar zichligi yarimo'tkazgichning kimyoviy potentsiali holatiga bog'liqligi yarimo'tkazgichlardagi zarrachalar diffuziyasi koeffitsientini harakatchan tok tashuvchilarning kimyoviy potentsiali holatiga (elektron va kovaklar uchun) va vakansiya hamda diffuziyalanuvchi zarralarning kulon o'zaro ta'sirlashuvchi olib keladi. Bu masalalar Valent va Ramasastr tomonidan, germaniydagi xususiy diffuziya holi uchun, umumiyashtirilgan holda-Svolin tomonidan olmos panjarali yarimo'tkazgichlardagi vakansion diffuziya mexanizmi uchun ko'rib chiqilgan.

Vakansiyalar yarimo'tkazgichlardagi elektronlarning energetik spektrida mahalliy donor yoki akseptor sathlari hosil qiladi. Bunday ionlangan sathlar soni (zaryadlangan vakansiyalar soniga teng) kristallning temperaturasi va elektrik faollashgan kirishma atomlari borligiga bog'liq bo'ladi. Mos ravishda N_v^- , N_v^o va N_v - orqali — zaryadlangan vakansiyalar, neytral vakansiyalar va vakansiyalarning umumiy molyar ulushini belgilaymiz. Zaryadlangan vakansiya ulushi N_v^- quyidagicha yozilishi mumkin:

$$N_v^- = \frac{N_v}{1 + \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)} \quad (5.44)$$

bu yerda: μ — kimyoviy potensial sathi (Fermi energiyasi), E_v — vakansiyaning akseptor sathi energiyasi. $N_v = N_v^o + N_v^-$ bo'lgani bois,

$$N_v^- = N_v^o \exp\left[\frac{(\mu - E_v)}{kT}\right]. \quad (5.45)$$

Qulaylik uchun p_v kattalikni - kirishma ionining vakansiya qo'shni holatda bo'lishi ehtimolini kiritamiz. Bu kattalikni

$$p_v = p_v^o + p_v^- \quad (5.46)$$

ko'rishda yozamiz, bu yerda p_v^o — kirishma ionining neytral ion yonida bo'lish ehtimolligi, p_v^- — zaryadlangan vakansiya bilan qo'shni bo'lish ehtimolligi. Boshqa tomondan, panjara atomi vakansiya bilan qo'shni bo'lish ehtimoli quyidagicha ham yozilishi mumkin:

$$p_v = ZN_v, \quad (5.47)$$

bu yerda Z — koordinatsion son. Erituvchi atom yaqinida vakansiya hosil bo'lish energiyasini Δu_v orqali belgilaymiz, kirishma ioni yaqinida vakansiya hosil bo'lish energiyasini $\Delta u_v'$ orqali belgilasak,

$$p_v^o = ZN_v^o \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right), \quad (5.48)$$

bu yerda $\Delta U_s = \Delta U_v - \Delta U_v'$ (ikki holat oralig'idagi entropiyaning kichik o'zgarishini e'tiborga olmagan holda).

Shunga o'xshash kirishma to'liq ionlashganda

$$p_v^o = ZN_v^- \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_c}{kT}\right), \quad (5.49)$$

ΔU_c — zaryadlangan vakansiya va zaryadlangan ionlar orasidagi Kulon

o'zaro ta'sirlashuv energiyasi. (5. 45) ni (5.49) ga qo'ysak,

$$p_u^- = ZN_v^o \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right). \quad (5.50)$$

Neytral vakansiyalar zichligi faqat temperatura funksiyasi ekanligi bois,

$$N_v^o = \exp\left(-\frac{\Delta G_v}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta U_v}{kT}\right) \exp\frac{\Delta S}{k}, \quad (5.51)$$

bunda: ΔG_v — vakansiya hosil bo'lishining erkin energiyasi, ΔS — faollanish entropiyasi. (5. 51) ni (5. 50) qo'ysak,

$$p_u^- = Z \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_s - \Delta U_c - \Delta U_v}{kT}\right), \quad (5.52)$$

$$p_v = p_u^- + p_v^o = Z \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_s + \Delta U_v}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]. \quad (5.53)$$

Endi kirishma atomlari diffuziyasi koeffitsienti uchun ifoda chiqaramiz. Diffuziya koeffitsienti uchun umumiy ifoda quyidagicha berilishi mumkin:

$$D = \frac{1}{6} d^2 \nu, \quad (5.54)$$

bu yerda: d — atomning sakrash uzunligi, ν — o'tishlar chastotasi,

$$\nu = p_v \nu \exp\left(-\frac{\Delta U_j}{kT}\right).$$

ΔU_j — atomning muvozanat holatidan potensial to'siq cho'qqisiga o'tishi uchun zarur bo'lgan izotermik ishiga mos keluvchi erkin energiyaning o'zgarishi.

Olmos tuzilishli kristallar uchun $dq \frac{\sqrt{3}}{4} a$ ga teng, bu yerda a — panjara doimiysi r_v uchun (5. 53) formuladan foydalanilsa, diffuziya koeffitsienti uchun quyidagi ifodani olish mumkin

$$D = \frac{1}{8} a^2 \nu \exp\left(\frac{\Delta S_s + \Delta S_j}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_v + \Delta U_s + \Delta U_j}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]. \quad (5.55)$$

ΔS_s va ΔS_j — vakansiya hosil bo'lish va diffuziyalanuvchi zarralarning vakansiyalarga o'tish entropiyalari (kichik entropiya hadlari S_s va S_c bu yerda e'tiborga olinmaydi). (5. 55) formula bu yerda Vert-Ziner formulasiga nisbatan qo'shimcha hadlar $1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)$ va $\exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right)$ bor, ular μ , E_v , U_c va U_s bilan aniqlanadi. Ko'rsatilgan energetik parametrlar zaryad

va kirishma ion o'lchamiga, shuningdek Fermi sathining holatiga va vakansiyaning akseptorlik sathiga bog'liq. Bu kattaliklarning qiymatlari mos keluvchi formulalardan olinishi mumkin.

Kirishma ion va vakansiya U_c elektrostatik o'zaro ta'sir energiyasini quyidagi formuladan hisoblash mumkin.

$$\Delta U_c = \pm \frac{q_v q_i}{\chi d}, \quad (5.56)$$

bu yerda: q_v, q_i — vakansiya va kirishma ion zaryadlari, χ — kristallning dielektrik doimiysi.

Nuqson hosil bo'lish energiyasining kirishma atomi yaqinida kamayishi ΔU_s , Fridel formulasi bilan topilishi mumkin.

Tajriba ma'lumotlari bilan taqqoslash qulayligi uchun ko'pincha kirishma ionlar diffuziya koeffitsienti D_i ning o'zdiffuziya koeffitsienti $D_{o'd}$ ga nisbatidan foydalaniladi. Olmos turidagi kristall panjarada o'zdiffuziya koeffitsienti quyidagi formula orqali ifodalanadi:

$$D_{o'd} = \frac{1}{8} a^2 v \exp\left(\frac{\Delta S_{o'} + \Delta S_i}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_{o'} + \Delta U_i}{kT}\right), \quad (5.57)$$

$$\frac{D_i}{D_{o'd}} = \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]. \quad (5.58)$$

Shunday qilib, kristallda xususiy nuqsonlar va kirishma atomlari mavjudligiga bog'liq bo'lgan o'zdiffuziya koeffitsienti ifodasini olish mumkin. Kirishma va xususiy nuqsonlari sathlar xususiy yarimo'tkazgichga nisbatan kimyoviy potensial sathini suradilar. Bu omilni hisobga olish o'zdiffuziya koeffitsientini kimyoviy potensial sathiga bog'liq funksiya sifatida ifodalash imkonini beradi.

5.6. Yarimo'tkazgichlarda diffuziyaning dissotsiativ mexanizmi

Yarimo'tkazgichlarda vakansion va tugunlararo diffuziya mexanizmidan tashqari vakansiya va tugunlar oralig'i bo'ylab kirishmaning bir vaqtdagi diffuziyasi kuzatiladi. Bunda vakansiyalar va tugunlar oralig'i bo'ylab, kirishma atomlari turli zaryadli holatlarda harakatlanishi mumkin, bu bir necha o'zaro bog'langan diffuzion oqimlar vujudga kelishiga olib keladi, ular orasida atomlarning tinimsiz almashinuvi amalga oshiriladi. Diffuziyaning bunday mexanizmi dissotsiativ diffuziya deb ataladi. U mis

guruhidagi elementlari va $A^{III}B^V$ birikmalar elementlari diffuziyasi uchun xos. Misning germaniyda dissotsiativ diffuziya mexanizmi Frenk va Ternbol va Stredj tomonidan tahlil qilingan, $A^{III}B^V$ birikmalardagi dissotsiativ diffuziya ko'rib chiqilgan.

Avvalo, zaryad holatini e'tiborga olmay, kirishmaning bir vaqtda vakansiya va tugunlar oralig'i bo'ylab diffuziyasini ko'rib chiqamiz. Diffuziyalanuvchi zarraning tugundan tugunlar oralig'iga va aksincha o'tishi quyidagi reaksiya ko'rinishida yozilishi mumkin.



A^s — bu yerda tugundagi atom, A^i — tugunlar oralig'idagi atom, V — vakansiya.

Agar, mos ravishda atom va vakansiyalar zichlik miqdorini N_s , N_i va N_v bilan belgilasak, vaqt o'tishi bilan atomlarning vakansiyadagi konsentratsiyasi bimolekulyar reaksiyasining o'zgarishi

$$\tau \frac{\partial N_s}{\partial t} = KN_i N_v - N_s, \quad (5.60)$$

tenglama orqali yozilishi mumkin:

$$K = \frac{N_s^i}{N_i^i N_v^i},$$

bu yerda: shtrix bilan zichliklarning muvozanatiy qiymatlari belgilangan (eruvchanlik) τ — vaqt konstantasi. Xuddi shunday tenglama tugunlar oralig'idagi atomlar zichligi o'zgarishi uchun ham tuzilishi mumkin. Bunda, zichliklarning muvozanatiy qiymati, τ — vaqt konstantasi faqat temperatura funksiyasi deb hisoblanganda aralashma atomlarning vakansiyalar bo'ylab diffuziya koeffitsiyenti (D_v) tugunlararo diffuziya koeffitsientidan (D_i) ancha kichik, vakansiyalar bo'ylab kirishma oqimini e'tiborga olinadi va bir xil hollarda diffuziyalanuvchi atomlar va vakansiyalar uchun diffuziya tenglamalari quyidagi ko'rinishda yoziladi:

$$\frac{\partial}{\partial t}(N_i + N_s) = D_i \frac{\partial^2 N_i^2}{\partial x^2}, \quad (5.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(N_v + N_s) = D_v \frac{\partial^2 N_v^2}{\partial x^2} + K_v (N_v^i - N_v), \quad (5.62)$$

D_v — vakansiyalar diffuziya koeffitsiyenti, K_v — monomolekulyar reaksiyalarda kristallardagi vakansiyalarning generatsiya tezligini bildiruvchi konstanta. (5.60) — (5.62) tenglamalar umumiy holda murakkab ko'rinishga ega, shuning uchun bir necha xususiy hollar ko'rilgan. Birlamchi reaksiyalardagi mahalliy muvozanat juda tez bo'ladi deb faraz qilindi ($\tau = 0$). Bunda 2-variant o'rinli bo'lishi

mumkin: 1) K_v konstanta juda katta, shuning uchun vakansiyalar zichligi N_v muvozanatdagi dan katta farq qilmaydi va cheklovchi jarayon bo'lib kirishmaning tugunlar oralig'idagi diffuziya jarayoni sızmat qiladi. 2) K_v juda kichik, masalan, vakansiyaning asosiy manbai bo'lib sirt xizmat qiladi, $\tau = 0$ bo'lgan (5.61) va (5.62) tenglamalar Fikning oddiy tenglamalari ko'rinishini oladi, ammo ularga

$$D_1 = \frac{N'_1 D_1}{N'_1 + N'_s}, \quad (5.61)$$

va

$$D_2 = \frac{N'_u D_u}{N'_u + N'_s} \quad (5.62)$$

effektiv diffuziya koeffitsientlari kiradi.

Bu yerda ko'rilgan K_v ning oraliq qiymatlari holi ancha murakkab hisoblanadi.

Bu yerda bayon qilingan diffuziyaning dissotsiativ mexanizmi bayonida kirishma zarralarining turli zaryad holatlarida vakansiya, hamda tugunlar oralig'ida joylashish ehtimoli e'tiborga olinmagan. Bu xol e'tiborga olinsa, masalan, yechim turli zaryad holatlardagi zarralar uchun turlicha diffuziya koeffitsientli qo'shimcha diffuziya oqimlari paydo bo'lishi hisobiga va shuningdek har bir zaryadli zarralari holatda zarralarning zichligi yarim o'tkazgichdagi Fermi sathining holatiga bog'liq bo'lgani uchun murakkablashadi.

Fermi sathi o'z navbatida kirishma atomlari zichligiga bog'liq, kirishma zichligi esa diffuziya natijasida kristall bo'ylab notekis taqsimlangan, bu esa diffuziya koeffitsientining yarimo'tkazgichning kimyoviy potensial sathi va diffuziyalanuvchi kirishma zichligining o'zaro murakkab bog'lanishiga olib keladi. Tabiiyki, bu holda zichlik taqsimoti ham murakkab xarakterga ega bo'ladi. Bu xol izokonsentratsion diffuziya usulini qo'llanilganda bartaraf etilishi mumkin. Bunda kristall oldindan diffuziyalanuvchi kirishma bilan to'yinguncha legirlanadi, keyin esa diffuzion taqsimlanish nishonli atomlar yordamida tekshiriladi. Bunda zichlik taqsimoti doimiy diffuziya koeffitsientli Fik tenglamasining yechimi orqali ifoda etiladi.

Turli zaryadli zarralar hollarida diffuziyaning dissotsiativ mexanizmida yuzaga keluvchi diffuziya koeffitsientining zichlikka bog'liqligini misol qilib, ruxning galliy va indiy arsenidlardagi diffuziyasini ko'rib chiqamiz

Cheng va Pirson tomonidan bajarilgan, Zn ning GaAs dagi diffuziya koeffitsientining zichlikka bog'liqligini hisoblashda quyidagi mezonlar asos qilib olingan arsined galliy panjarasi osti vakansiyalarida rux neytral

atom yoki boshqa kirishmalar bilan ionli muvozanatda turuvchi bir marta zaryadlangan manfiy ionlar ko'rinishida joylashadi. 2) Atomlarning kamroq qismi tugunlar oralig'ida ikki marta zaryadlangan musbat ionlar ko'rinishida bo'ladi; 3) Galliy panjarasidagi vakansiyalar neytral va hamma vaqt ularning miqdoriy zichligi ta'minlanadi; 4) Rux diffuziyasi tugunlar oralig'ida ham, vakansiyalar bo'ylab ham amalga oshadi; Ruxning zichligi yuqori bo'lganda tugunlar oralig'idagi diffuziya ustun turadi.

Vakansiya va tugunlar oralig'idagi bir vaqtdagi diffuziya usulida diffuziya tenglamasi quyidagicha yoziladi:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial N_i}{\partial x} + D_s \frac{\partial N_s}{\partial x} \right), \quad (5.65)$$

bu yerda: N — ruxning umumiy zichligi, $N = N_i + N_s \approx N_s$, $N_i \approx N_i^{2+}$

$$D_{\text{eff}} = D_i \frac{\partial N_i}{\partial N} + D_s \frac{\partial N_s}{\partial N} \quad (5.66)$$

diffuziyaning effektiv koeffitsientini kiritib va diffuziyaning tugunlararo

tarkiblovchisining ustunligini $D \frac{\partial N_i}{\partial N} \gg D_s \frac{\partial N_s}{\partial N}$ e'tiborga olsak,

$$D_{\text{eff}} = D_i \frac{\partial N_i}{\partial N}. \quad (5.67)$$

Ruxning tugunlari oralig'idan vakansiyalarga va aksincha o'tishini quyidagi reaksiya ko'rinishida yozish mumkin:



Bu reaksiyaga ta'sir qiluvchi massalar qonunini qo'llab,

$$N_i = \left(k_1 / N_v^o \right) (\gamma p)^3 N^-. \quad (5.69)$$

ifodani olamiz. Bu yerda: k_1 — muvozanat konstantasining teskari qiymati, N_v^o — galliy panjarasidagi vakansiyalar zichligi, p — kovaklar zichligi, γ — elektron gazi paydo bo'lish sathini hisobga olish uchun kiritilgan faollik koeffitsienti. Kirishma sohasida $N \gg n_i$ va neytrallik sharti bo'lib $N^- = p$ tenglik bo'ladi. Agar bu shartni (5.69) ga qo'yib, γ ning p ga (yoki N^-) va N^- — ruxning to'liq zichligiga) bog'liqligini e'tiborga olib, diffuziya koeffitsientining zichlikka bog'liqligini aniqlovchi $\frac{\partial N_i}{\partial N}$ nisbat uchun quyidagi ifodani olish mumkin:

$$\frac{\partial N_i}{\partial N} = \frac{k_i}{N_v^0} \left[4\gamma^3 (N^-)^3 \frac{\partial N^-}{\partial N} + 3\gamma^2 (N^-)^4 \frac{4\partial\gamma}{\partial N} \right]. \quad (5.70)$$

(5.70) ni (5.67) ga qo'ysak,

$$D_{eff} = K \left[\frac{\gamma^3 (N^-)^4}{4} [F][4+3G] \right], \quad (5.71)$$

bu yerda: $K = k_i D_i / N_v^0$, $F = \frac{\partial \ln N^-}{\partial \ln N}$ va $G = \frac{\partial \ln \gamma}{\partial \ln N}$.

Boshqa tomondan, ionlashgan akseptorlar (manfiy zaryadlangan rux ionlari) zichligi N^- umumiy N zichligi bilan quyidagi tenglama orqali bog'langan

$$N^- = \frac{N}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)}. \quad (5.72)$$

(5.69) ga kiruvchi γp quyidagi formula

$$\gamma p = 2 / h^3 (2\pi m^* kT)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right). \quad (5.73)$$

orqali ifodalanadi. Formulaga xar bir N konsentratsiya uchun N^- , F , larni qo'yib, ($F-N^-$ ning N ga bog'liqlik grafigidan topiladi), γ va G (γ va G alohida baholangan)ning tajriba ma'lumotlari bilan mos keluvchi Zn ning GaAs ga diffuziyalanishi koeffitsientining konsentratsion bog'liqligi olingan.

Zn ning ZnAs ga diffuziyalanishi koeffitsientining konsentratsiyaga bog'liqligini hisoblashda, asosan ruxning indiy arsenididagi zaryadli holati haqidagi tajriba ma'lumotlari asosida bajarilgan, diffuziya ikkita o'zaro bog'liq oqim manfiy zaryadlangan Zn_g^- ionlari ko'rinishida va tugunlar oralig'ida ikki marta zaryadlangan musbat ionlar Zn_i^{2+} ko'rinishida yuz beradi hamda vakansiya va tugunlar oralig'ida rux bilan tugunlararo atomlar almashinuvi neytral holatlar orqali yuz beradi deb hisoblangan.



Bu reaksiyaning muvozanat doimiysi ta'sirlashuvchi massalar qonuni asosida berilgan temperaturada quyidagi shartdan olinadi:

$$K = \frac{1}{N_v^0} \cdot \frac{N_g^0}{N_i^0}. \quad (5.75)$$

Vakansiyalar va tugunlar oralg'idagi turli zaryadli holatlardagi (11) atomlari zichliklari orasidagi bog'lanish quyidagicha aniqlanadi:

$$N_i^o = N_i F_1, \quad (5.76)$$

$$N_i^+ = N_i (1 - F_1), \quad (5.77)$$

$$N_i^{2+} = N_i^+ (1 - F_1^*), \quad (5.78)$$

$$N_g^o = N_g (1 - F_2). \quad (5.79)$$

Bu yerda: F_1 , F_1^* va F_2 — Fermi taqsimot funksiyasi:

$$F_1 = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(E_d - \mu)} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(-\mu)}, \quad (5.80)$$

$$F_1^* = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(-E_i - \mu)}, \quad (5.81)$$

$$F_2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(E_a - \mu)}. \quad (5.82)$$

Bu yerda: E_i va μ — mos ravishda taqiqlangan soha kengligi va Fermi sathi; E_d va E_a — ruxning birinchi donor sathi tugunlar oralg'ida va vakansiyadagi ruxning akseptor sathi. $N = N_i + N_s \approx N_s$ bo'lgani uchun, (5.82) ga N_s^o va N_s^+ ni quyib, N_s va N_i^{2+} orqali, (5.76-5.82) asosida,

$$\frac{N_i^{2+}}{N} = \frac{1}{kN\nu} \frac{\frac{1}{2} \exp(-\mu) \frac{1}{2} \exp(-E_i - \mu)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp(E_i + \mu) \right]} = K_2 f(\mu) \quad (5.83)$$

ifodani olamiz. Bu yerda: K_2 — konstanta. Boshqa tomondan, vakansiyalardagi ruxning diffuziya koeffitsienti tugunlar oralg'idagi ruxning diffuziya koeffitsientidan bir necha marta kichikligi bois $D_s \ll D_i$, xuddi ruxning galliy arsenidi holidek, effektiv diffuziya koeffitsienti D_{eff} ruxning tugunlar oralg'idagi atomlari ulushi bilan aniqlanadi $\left(\frac{\partial N_i}{\partial N} \right)$:

$$D_{eff} = D_i \frac{\partial N_i}{\partial N}. \quad (5.84)$$

InAs da rux tugunlar oralg'ida ikki marta ionlashgan musbat ionlar

hommishida diffuziyalangani uchun

$$D_{\text{eff}} = D_i \frac{\partial N_i^{2+}}{\partial N}. \quad (5.85)$$

(5.83) asosida

$$\frac{\partial N_i^{2+}}{\partial N} = K_2 \left(f(\mu) + \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \ln N} \right). \quad (5.86)$$

$f(\mu)$ va $\frac{\partial f}{\partial \mu}$ ning qiymati (5.83) dan aniqlanadi, Fermi sathining rux atomlari zichligiga bog'liq holda o'zgarishi neytrallik tenglamasidan topiladi.

$$N_s^- + n = p + N_i^+ + N_i^{2+}. \quad (5.87)$$

D_{eff} ning va ZnAs dagi ruxning N zichligiga bog'liqligini berilgan formulalar asosida bajarilgan hisoblash natijalari ko'rsatishicha, $D_{\text{eff}} \sim N^{1.9}$ tajribalardan olingan bog'liqlik $N^{1.85}$ ga mos keladi. N_n qiymatning $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dan kam sohasida bunday bog'liqlik kuzatilmaydi.

Shunday qilib, effektiv diffuziya koeffitsientining atomlar zichligiga bog'liqligi ushbu holda diffuziya koeffitsientining yarimo'tkazgichdagi Fermi sathining holatiga bog'liqligi bilan belgilanadi.

Bu yerda Zn ning GaAs dagi diffuziya koeffitsientining Fermi sathiga bog'liqligi ichki elektr maydonini hisobga olgan holda hisoblab chiqilgan.

Takrorlash uchun savol va masalalar

1. Kristallarda kirishma atomlari birikmalari hosil bo'lishining sabablari va oqibatlari qanday?

2. Kirishmaviy yarimo'tkazgichlarda ichki elektr maydoni vujudga kelishi sabablari nimada?

4. Effektiv diffuziya koeffitsienti nimalarga bog'liq?

5. Doimiy manbadan bir tomoni chegaralangan jismga diffuziyani qanday tushunish mumkin?

5. Vakansiyalar orqali diffuziya mexanizmlarini tushuntiring.

6. Diffuziyaning dissotsiativ mexanizmini tushuntiring.

7. Diffuziya jarayonlarida neytrallik sharti nima?

8. Solishtirma qarshiligi $5 \Omega \cdot \text{sm}$ bo'lgan n -turli germaniy kristalidan zichligi $0,1 \text{ A/sm}^2$ bo'lgan tok oqmoqda. Qancha vaqtda elektronlar $5 \cdot 10^{-3} \text{ sm}$ masofani bosib o'tadi? (*Javob:* $t=2,56 \text{ mks.}$)

9. Solishtirma qarshiligi $5 \Omega \cdot \text{sm}$ bo'lgan p -turli kremniy kristalidan

zichligi 10 mA/sm^2 bo'lgan tok oqmoqda. Elektronlar va kovaklar o'rtacha dreyf tezliklari aniqlansin. (Javob: $v_n=25 \text{ sm/s}$, $v_p=70 \text{ sm/s}$.)

10. $20 \text{ }^\circ\text{C}$ temperaturada o'lchamlari $0,25 \times 0,25 \times 0,05 \text{ sm}$ bo'lgan yarimo'tkazgich na'munada zaryad tashuvchilar konsentratsiyasi 10^{15} sm^{-3} bo'lib, uning yupqa tomonlariga 20 V kuchlanish qo'yilgan. Agar harakatchanligi $500 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ bo'lsa, tok kuchi aniqlansin. (Javob: $I=0,6 \text{ mA}$.)

11. Zaryad tashuvchilarning diffuziya koeffitsienti $D_n=10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$, yashash vaqti $\tau=10^{-4} \text{ s}$ bo'lsa va na'munada $E=10^4 \text{ V/m}$ elektr maydon hosil qilinsa, diffuziya va dreyf uzunliklari nisbati aniqlansin? $T=300 \text{ K}$. (Javob: $L_n/L_E=2,6 \cdot 10^{-3}$.)

12. Agar kovaklarning diffuziya uzunligi $0,7 \text{ mm}$ bo'lsa, kuchlanganligi 5 V/m bo'lgan elektr maydonida hona temperaturasidagi n -turli germaniydagi kovaklarning dreyf uzunligi aniqlansin. (Javob: $L_E=0,95 \text{ sm}$.)

6-BOB. KREMNIYDA ATOMLAR DIFFUZIYASI

Hozirgi vaqtda kremniy yarimo'tkazgichli asboblari, qurilmalar, mikrosemalar tayyorlash uchun keng qo'llaniladigan xom ashyodir. Diffuziya $p-n$ o'tish olishning asosiy texnologik uslubi bo'lgani uchun, kremniyda diffuziyani kuzatishga ko'plab tadqiqotlar bag'ishlanganligi mashhurdir. Ulardan kupchiligi, ayniqsa, so'nggi yillarda nashr etilganlari, yarimo'tkazgichli asboblari tayyorlashning diffuziya texnologiyasi bilan bog'liq masalalardir. Ushbu bobda kremniyda ishmalarning diffuziyasiga xos bo'lgan umumiy qonuniyatlarni ko'rib chiqamiz.

6.1. Kremniyda donor va akseptor kirishmalar diffuziyasi

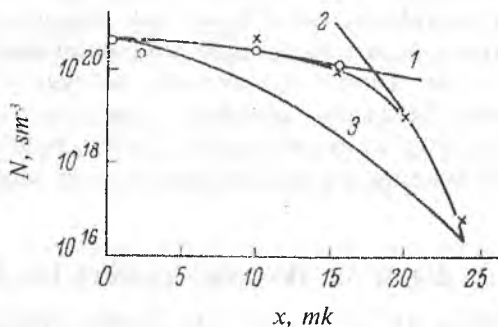
Davriy sistemaning III va V guruh elementlari diffuziyasi bo'yicha birinchi tadqiqotlar 1954-yil boshlangan. Bor va fosforning diffuziya koeffitsientlarini aniqlash uchun qatlamni birin-ketin kamaytirib elektr o'tkazuvchanlikni o'lchashga asoslangan uslub qo'llanilgan.

Davriy sistemaning III va V guruhlarining boshqa elementlari Si ga diffuziyalanishi boshlang'ich solishtirma qarshilik ρ_1 va ρ_2 ga ega bo'lgan ikki namunada $p-n$ o'tishning yotish chuqurligini taqqoslash usuli yordamida tekshirilgan. $p-n$ o'tishning yotish chuqurligini aniqlash uchun namunalar yuqori haroratda diffuzion qizdirilib olingan namuna bir tomoni kichik burchak ostida ($\sim 5^\circ$) silliqilgan, keyin shu qiya tekislik yuzasi tarkibida biroz HNO_3 bo'lgan konsentrlashgan HF kislotasi bilan ho'llanadi. Bunda p -soxa to'q tusga kiradi, n -soxa esa ochrangligicha qoladi. $p-n$ o'tish chuqurligi mikroskop yordamida aniqlanadi.

Diffuziyalanuvchi kirishma atomlarining chegaradagi konsentratsiyasi namunaning legirlash darajasigaga bog'liq bo'lmagan holda va turli solishtirma qarshilikka ega namunalarda $p-n$ o'tishning yotish chuqurligini diffuzion qizdirish jarayonida legirlanuvchi kirishmaning qayta taqsimlanishini e'tiborga olmaslik diffuziya koeffitsientini bir qiymatni aniqlash imkonini beradi.

Fosfor atomlari keng qo'llaniladigan donor xarakterli kirishma bo'lib hisoblanadi. Fuller va Dittsenberger o'lchashlari fosforni Si-da erfs-bog'liqlikka mos keluvchi konsentratsion taqsimotini olish imkonini berdi. Olingan ma'lumotlar bo'yicha fororning Si-dagi diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi ham aniqlandi. Ammo, Subanev va Makintosh tadqiqotlari kremniyda fosforning zichligi taqsimoti noan'anaviy ko'rinishga ega ekanligini ko'rsatdi. Fosforning effektiv diffuziya koeffitsienti sirtiy

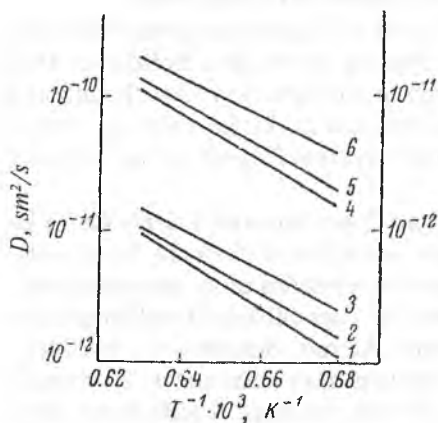
zichlikka va namunaning legirlanganlik darajasiga bog'liq (6.1-rasm). Bunda diffuziyani faollashtirish energiyasi va eksponenta oldidagi ko'paytiruvchi tajribada aniqlangan shunday kattaliklardan keskin farq qiladi.



6.1-rasm. Kremniyda fosfor diffuziyasi;
1 — sirt yaqinida, 2 — hajmda, 3 — erfc funktsiya.

Margumushning kremniydagi diffuziyasi birinchi bor Fuller va Dittsenberg tomonidan tekshirilgan, ular diffuzion qizdirishlarni kavsharlangan kvarts ampulalarda o'tkazgan.

Armstrong margumush diffuziyasini gaz-tashuvchi (kislorodli azotda) oqimida bug'li fazada, Fuller va Dittsenberglar olgan temperatura oralig'ida, p - n o'tish usulini qo'llagan holda o'rgangan. Armstrong topgan diffuziya parametrlari oldin olingan natijalardan yuqori bo'lib chiqdi, bu ikkala ishdagi farq chegaraviy konsentratsiyalarining farqi mavjudligi bilan tushuntirildi.



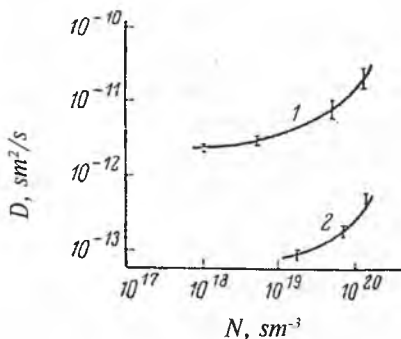
6.2-rasm. Turli sirtiy konsentratsiyalar qiymatlari uchun kremniyda fosfor atomlari effektiv diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi.

Masters va Feyrild izokonsentratsion diffuziya va neytronlar yordamida fuqallashtirish texnikasini qo'llab, margumushning diffuziya koeffitsienti elektronlar zichligi ortishi bilan ortib borishini ko'rsatib berdilar. o'ziga yaqin material uchun ular $850 \div 1150$ °C oralig'ida Armstrong ma'lumotlari bilan deyarli mos keladigan diffuzion parametrlar olishgan (6.1-jadvalga qarang).

Sb¹²⁴ izotop yordamida Rogan hamkasblari bilan surmaning Si dagi diffuziyasini batafsil tekshirdilar va Fullerning *p-n* o'tish usulida olingan natijalari bilan deyarli to'g'ri keluvchi natijalarni oldilar.

Akseptor kirishmali III guruh elementlaridan (B) — borning diffuziyasi ko'plab marotaba tadqiqot etilgan. Bor (B) atomlari diffuziya parametrlari Si da bir necha marta o'lchangan va ularning qiymatlari bir-biridan katta farq qilmaydi. Kuzatilgan farq V diffuziya koeffitsientining Sidagi dastlabki legirovchi kirishma atomlari zichligiga bog'liqligi sabablidir. Fosfor misolida bu bog'liqlik bevosita tajribalar legirlanuvchi forfor zichligi ortganda, diffuziya koeffitsientining ortishi ko'rsatib berilgan.

Forfor bilan bo'lgan holatdagidek, katta chegaraviy zichliklarida borning (B) konsentratsion taqsimlanishi erfc-funktsiya bilan ifoda qilinmagan. Buning sababi diffuziya koeffitsientining B konsentratsiyasiga bog'liqligidir (6.3-rasm).



6.3-rasm. Diffuziya koeffitsientining B konsentratsiyasiga bog'liqligi.

Alyuminiyning kremniydagi diffuziyasi Miller va Sevedj tomonidan tekshirilgan. Diffuzion qizdirish uchun kremniy va alyuminiy namunalari solishtirma qarshiligi $20 \Omega \cdot \text{sm}$ bo'lgan konteynerga joylangan.

O'z navbatida bu konteyner tantal trubkaga, u esa kvarts trubkaga joylashtirilgan. Bu extiyot choralari tekshirilayotgan namunalarni kvarts bilan reaksiyaga kirishmasligi maqsadida qilingan. Kvarts trubka orqali tozalangan argon yoki geliy 2,5 l/min tezlik bilan o'tkazilib turilgan.

Yuqori temperaturalarda tantal xuddi argon va geliy kabi bir qator kirishmalar uchun getter tutib oluvchi kabi ta'sir qilganligi, kuydirishdan keyin sirti silliqdangan kremniyli namunalar dastlabki yarqiroqligini to'liq saqlab qolishi aniqlangan. Tekshirishlar margumush bilan legirlangan elektron turdagi kremniy kristallarida bajarilgan.

Diffuziya koeffitsientini aniqlash uchun bu yerda sig'imli uslub qo'llanilgan. Elektron-kovakli o'tish sig'imining teskari siljish kuchlanish kattaligiga bog'liqligini o'lchab, elektron-kovakli o'tishda diffuziyalanuvchi kirishma atomlari zichligining gradiyentini hisoblash mumkin. Zichligi butun bir sig'im bo'yicha deyarli doimiyligi uchun (margumushning diffuziya tezligi alyuminiy diffuziya tezligidan ancha kam), sig'imli uslub bilan aniqlanayotgan zichlik gradiyentini to'liq holda alyuminiy diffuziyasiga hisobiga deyish mumkin. Bunda a zichlik gradienti diffuziya koeffitsienti D ga bog'liq

$$a = \left(\frac{\partial N}{\partial x} \right)_{x=x_0} = N_0 (\pi Dt)^{-1/2} \exp(-\eta_0^2), \quad (6.1)$$

bu yerda

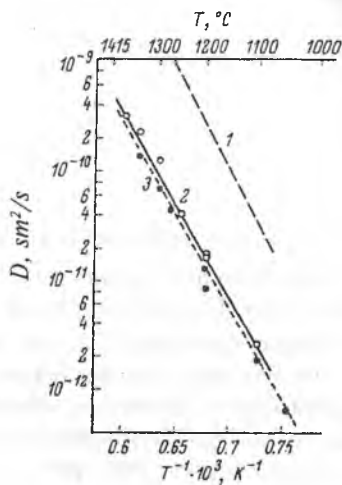
$$\eta_0 = x_0 (4Dt)^{-1/2}. \quad (6.2)$$

(6.1) va (6.2) larni taqqoslasak,

$$\eta^{n_1} (\exp \eta_0^2) \operatorname{erfc} \eta_0 = \frac{x_0^2}{96\pi^{3/2}} \times \frac{N_d x A^3}{x_0} \beta. \quad (6.3)$$

Bu yerda, N_d — donor atomlar zichligi. N_d , x , A va x_0 tajribada o'lchanganligi uchun, yuqorida keltirilgan tengliklardan β , η_0 , D va N_0 ni aniqlash mumkin. Alyuminiyning kremniydagi diffuziya koeffitsientining turli temperaturalardagi qiymati 6.4-rasmدا berilgan, o'sha yerda taqqoslash uchun boshqa tadqiqotlarning ma'lumotlari ham keltirilgan.

6.4-rasm. [3] va boshqa ishlarga asosan kremniyda Al diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi.

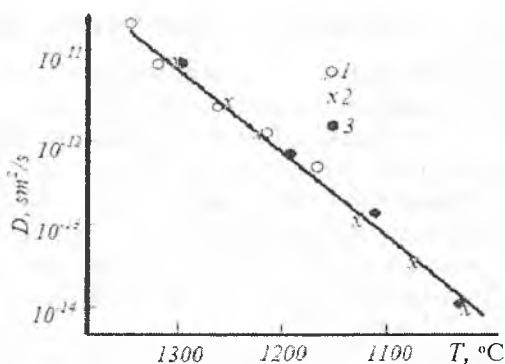


6.2. IV guruh elementlarining kremniydagi diffuziyasi

Kremniydagi o'zdiffuziya nisbatan yaqin vaqtlarda o'rganilgan, bunda ko'p mualliflarning tadqiqot natijalari, germaniydagi o'z diffuziya jarayonlaridan ko'ra ko'proq farq qiladi, bunda qisqa yashovchi izotoplar bilan ishlash vaqtidagi tajriba qiyinchiliklarga bog'liq (ishlatilayotgan Si^{31} izotopining yarim parchalanish davri 2.6 soatga teng). Masters va Feyrfilel Si^{31} manbasi sifatida issiqlik neytronlar oqimi bilan bevosita 2 soat ichida nurlangan o'ta toza kremniy plastinkasidan foydalanishgan. Diffuziya toza va legirlangan kremniyning kimyoviy usul bilan silliqilgan plastinasida o'tkazilgan. Bunda, dislokatsiyalar zichligi 10^3 sm^{-2} dan kam bo'lib va namunalar yopiq ampulalarda joylashgan. Namunalar sirtiga Si^{31} ni tashib o'tish uchun ampulalarga vodorod xloridning birmuncha miqdori kiritilgan. Ularni issiqlik yordamida ishlov berishdan avval va keyingi o'lchashlarning ko'rsatishicha, bug'lanish va epitaksiya bo'lmagan qatlamlar anodli suvultirishda olingan, bunda konsentratsion chiziq xarakterini aniqlash uchun eritmaning radioaktivligi o'lchangan. Gxoshtagor kremniyning o'z diffuziyasi parametrlarini o'lchash uchun stabil izotop Si^{31} ni qo'llagan. Qayta termo ishlovdan keyin namuna issiqlik neytronlari bilan nurlangan va tsintilyatsion spektrometr yordamida berilgan γ -radioaktivlikning namunadagi qiymati qavatma-qavat tahlil asosida o'tkazilgan. Kremniyning o'z diffuziyasi ko'effitsientining temperaturaga bog'liqligi 6.5-rasmda ko'rsatilgan.

Ge va Si ning kovalentli kristallarida o'zdiffuziya metall atomlariga nisbatan pastroq tezlikda o'tadi va faollanish energiyasi kattaroq bo'ladi. Bu holat kremniy va germaniydagi o'z atomlari diffuziyasi jarayonlari asosan vakansiyalar bo'ylab migratsiya yo'li bilan amalga oshishini ko'rsatadi. Biroq, bunday vakansion mexanizm tajriba ma'lumotlarini xammasini ham, masalan, eksponentsial oldi ko'paytirgichining nisbatan katta qiymatini va legirlashning o'z diffuziyaga ta'sir ko'rsatish xarakterini tushuntirib bera olmaydi.

Feyrfilel va Masters tajribalarida o'z diffuziya ko'effitsienti legirlangan *n*- va *p*-turdagi kremniyda toza kremniyga nisbatan kattaroq ekanini ko'rsatadi. Ammo bu tajriba natijalar yagona nuqtaiy nazardan izoxlanmaydi. Shuning uchun mualliflar ikki xil mexanizm taklif qildilar: *n*-turdagi kremniyda o'z diffuziya jarayonining tezlashishi kristalldagi vakansiyalar akseptor xarakterda bo'ladi, shuning uchun ularning zichligi elektron materialda yuqoridir. *p*-turdagi kremniyda (bor bilan legirlangan) effektiv o'z diffuziya ko'effitsienti kristall panjaradagi katta mexanik kuchlanish hisobiga ortadi.



6.5-rasm. Pirta (1), Masters va Feyrfiled (2), va Gxoshtagor (3) larga asosan kremniyda o'zdiffuziya ko'effitsientining temperaturaga bog'liqligi.

Zeeger va Chik kremniyda tugunlararo o'z diffuziya mexanizmi haqida taxminlarni ilgari surdilar. Eritilgan kremniy monokristaliga nisbatan 9,6 % ga yuqori zichlikka egaligiga asoslanib, ular buzilgan kremniyda cho'zilgan vakansiya va tugunlar oraliq'i deb nomlanuvchi, yuzaga keluvchi narsalar borligini ularning hosil bo'lish entropiyasi yuqori bo'lib, eksponensial oldi ko'paytirgichning yuqori qiymatga olib kelishi haqidagi taxminlar bilan chiqdilar. «Cho'zilgan» tugunlar oraliq'i ham donorlik, ham akseptor xossalari ega bo'lishi kerak, ya'ni o'ziga yaqin bo'lgan soxada ularning zichligi minimal bo'ladi.

Uglerodning kremniydagi diffuziyasi tezligi Nyumen va Ueykfild tomonidan 1070 ÷ 1400 °C da uglerodning diffuziya koeffitsienti o'rganilgan va III guruh elementlari ichida eng katta qiymatga ega ($3 \cdot 10^{-12}$ dan $6,3 \cdot 10^{-10}$ sm²/s gacha) bo'lishi ko'rsatilgan.

Germaniyning kremniydagi diffuziya koeffitsientini D.A.Petrov xodimlari bilan aniqlagan. Ular, solishtirma qarshiligi 1 dan 10 Ω·sm ga teng bo'lgan p-turdagi kremniy namunasi sirtiga vakuumda changlatish yordamida o'tkaziladigan Ge⁷¹ radioaktiv izotopidan foydalanganlar.

Diffuzion qizdirish argon bilan to'ldirilgan kvarts ampulalarda o'tkazildi. Kirishma atomlar zichligi taqsimoti ham silliqlangan katlamlar nisbiy aktivligini o'lchash, ham namunaning qoldiq aktivligini o'lchash orqali aniqlandi. Natijalar bu ikki holda hech qanday anomaliya bo'lmasligini ko'rsatdi. Aytib o'tish joizki, aniqlangan germaniy atomlari diffuziyasini faollashtirish energiyasi, o'z diffuziya faollashtirish energiyasidan bir muncha yuqori. Agar kremniy atomlari germaniy atomlari bilan kimyoviy birikmalar hosil qilmasligini e'tiborga olinsa bu holat munozaralidir.

Qalayning diffuziya parametrlari kremniyda qalay bilan fosfor yoki borning bir vaqtdagi diffuziyasiasosida o'rganilgan. Diffuzion qizdirish 1050 ÷ 1200 °C oralig'ida o'tkazilgan. Kirishma manbasi sifatida mos holda, konsentratsiyasi $4 \cdot 10^{19}$; $1,7 \cdot 10^{21}$; $1,7 \cdot 10^{20} \text{ sm}^{-3}$ bo'lgan qalay, fosfor yoki bor bilan ligerlangan kremniy kukunidan foydalanilgan. Qalayning zichlik taqsimotini olish uchun namunalar neytronlar yordamida aktivlashishga duchor qilingan, keyin uch kunlik tindirishdan so'ng nisbiy radioaktivlikni namunani qavatma-qavat o'lchash usulida o'rganilgan.

O'z diffuziyani o'rganishda qalayning diffuziya koeffitsienti fosfor bilan legirlangan namunalarda ortishini va bor (B) bilan legirlashganda elektron turdagi kremniyda vakansiyalarning zichligiga bog'liq bo'lmasligi aniqlandi.

6.3. Kremniyda litiy ionlarining harakatchanligi va diffuziyasi

Kremniydagi litiy atomlarining diffuziyasi uning germaniydagi diffuziyasi holiga o'xshash tarzda yuz beradi. Litiy suqilma Si-Li qattiq eritmasini hosil qilib, Si da anomal (xos bo'lmagan) yuqori tezlikda diffuziyalanadigan donor kiritma sifatida namoyon bo'ladi. Birinchi marta litiyning kremniydagi diffuziyasi Fuller va Dittsenberg tomonidan p - n o'tish usuli bilan o'rganilgan Germaniy bilan solishtirganda litiyning kremniydagi diffuziya tezligi kichik temperatura sohasida (400 ÷ 500 °C) deyarli bir tartibga past (10^{-6} va $10^{-7} \text{ sm}^2/\text{s}$ Ge va Si uchun). Biroq, temperatura ko'tarilishi bilan bu farq kamayadi va 900 °C da litiyning germaniy va kremniydagi diffuziya tezliklari bir tartibda bo'ladi ($10^{-5} \text{ sm}^2/\text{s}$).

6.1-jadval.

$T, ^\circ\text{C}$	T, s	$E, \text{V}/\text{sm}$	$u \cdot 10^6, \text{sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$	$D \cdot 10^7, \text{sm}^2/\text{s}$
360	4500	12.0	0.258	0.147
390	4200	13.0	0.452	0.258
422	3600	11.3	0.675	0.405
460	4200	8.15	1.11	0.70
494	3600	7.55	1.64	1.08
527	3000	6.95	2.61	1.80
564	2040	7.23	4.36	3.15
620	1500	6.20	7.60	6.10
670	1200	4.21	11.0	8.95
707	660	4.75	14.0	11.8
780	360	3.68	23.0	20.9
877	300	3.40	37.0	27.3

Fuller va Severins litiy ionlarining kremniydagi harakatchanligini yuqorida bayon etilgan usullar yordamida batafsil o'rganishgan. $360 \div 860$ °C oralig'ida kremniya litiy bir marta zaryadlangan musbat ionlar sifatida harakatlanishi ko'rsatilgan. 6.1-jadvalda olingan Li atomlari harakatchanligi u qiymati va litiyning kremniydagi diffuziya koeffitsienti D turli temperatura T va qizdirish vaqtlari t da ko'rsatilgan. Harakatchanlikning qiymatlari bevosita Xoll koeffitsientini o'lchash yordamida, unga mos keluvchi D esa Eynshteyn

nisbati $\frac{U}{q} = \frac{D}{E}$ dan topilgan.

6.4. Ishqoriy elementlar diffuziyasi

E. Pell litiyning musbat ionlar ko'rinshida harakatlanish xossasidan foydalanib, uning kremniydagi kislorod bilan o'zaro ta'sirini o'rganish uchun kichik temperatura sohalarida diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligini aniqlagan. Pell tomonidan ishlab chiqilgan va asoslangan ionli dreyf usulidan p - n o'tishda maydon sig'imi y zaryad ionlarini olib o'tishi hodisasi kichik (10^{-18} sm²/s) diffuziya koeffitsientlarini o'lchash imkonini beradi.

Litiydan tashqari, kaliy va natriyning kremniydagi diffuziyasi ham o'rganilgan.

Barcha o'rganilgan ishqoriy metallar tez diffuziyalanovchi donorlardir, ular suqilma qattiq eritmalarini hosil qilishadi va tugunlar oralig'i bo'ylab ko'chishadi.

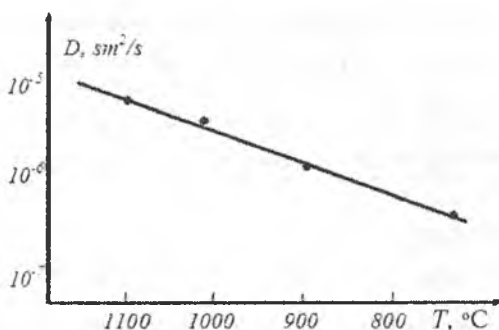
6.5. Kremniya misning diffuziyasi

Kremniya, germaniyadagidek, misning diffuziya tezligi anomal katta. Biz olgan ma'lumotlar bo'yicha $800 \div 1100$ °C da misning diffuziya koeffitsienti $4 \cdot 10^{-7}$ sm²/s dan $4 \cdot 10^{-6}$ sm²/s gacha o'zgaradi.

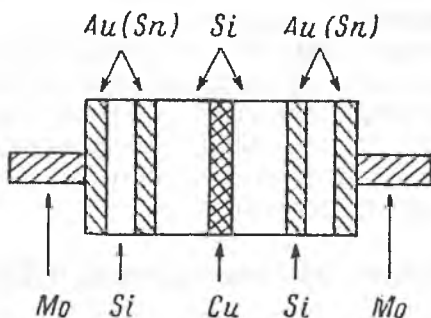
Kremniydagi misning diffuziya koeffitsienti germaniyadagidan 15-20 marta kam (solishtirilayotgan temperaturalarda). Bunday farq kuchli bog'lanishlar va shunga muvofiq ravishda kremniyning suyulish temperaturalari germaniynikidan yuqori bo'lishi bilan tushuntiriladi.

Kremniya misning diffuziyasi (6.6-rasm) doimiy elektr maydon ta'siri ostida tezlashishi yoki sekinlashishi mumkin. Misning Si ga o'tishini Gallerx tomonidan bajarilgan o'lchashlarining ko'rsatishicha, 1100 °C yaqinida mis musbat ion Cu^+ ko'rinishida harakatlanadi.

6.7-rasmda sxematik ravishda Gallerx foydalangan tajriba moslama ko'rsatilgan. Radioaktiv mis Cu^{64} manbasi molibdenli elektrodlar oralig'iga



6.6-rasm. Kremniya mis diffuziya koeffitsientining temperaturaga bog'liqligi.



6.7-rasm. Kremniya misning elektr ko'chirishini o'rganish bo'yicha tajriba sxemasi.

qisilgan ikki kremniy na'munalari orasiga joylashtirilgan. Namunaning qarama-qarshi chet yoqlari oltin yoki qalay bilan misni bog'lab olish uchun, qo'shimcha elektrod oldi Si esa namunalar temperaturasini va tekshirilayotgan namunalarda elektr maydonning notekisliklarini yo'q qilish uchun kiritilgan.

Diffuziyaga ta'sir qiluvchi elektr maydonning harakterini aniqlash va diffuziya koeffitsientini hisoblash uchun qabul qiluvchining yuza birligiga to'plangan mis atomlari miqdori (alohida anodda Q_+ va katodda Q_-) aniqlanadi. U o'lchashlarning nisbati orqali ifodalanadi

$$\frac{Q_+}{Q_-} = \exp \frac{uE}{D} \quad (6.4)$$

Bu yerdan uE/D miqdorini, Eynshteyn munosabatidan foydalangan holda diffuziyalanuvchi zarralar zaryadini aniqlash mumkin. Gallaxer olgan natijalar 6.2-jadvalda keltirilgan.

6.2-jadval. Kremniya misning elektr maydonida diffuziyasi.

T, °C	E, V/sm	$Q_a \cdot 10^{-14}, \text{sm}^{-2}$	$Q_Q \cdot 10^{-14}, \text{sm}^{-2}$	η
1000	1.96	1100	15	0.83
1060	1.43	180	6.2	1.15
1080	1.49	290	2.9	0.94
1125	1.44	310	7.6	1.23
1135	0.99	150	3.0	1.22
1200	1.46	150	7.3	1.03

Jadvaldan ko‘rinib turibdiki, katodda (Q) cho‘kayotgan mis miqdori anodda (Q_a) o‘tirayotgan mis miqdoridan deyarli ikki tartibga ko‘p. Demak, kremniya mis musbat ionlar ko‘rinishida bo‘ladi. Bu ionlar zaryadi +I ga teng (tajriba xatoliklari chegarasida).

Gallaxer bahosi bo‘yicha 1100 °C da kremniya eritilgan misning umumiy miqdoridan 35% i tugunlar oralig‘ida musbat ionlar ko‘rinishida harakat qiladi. Bu ionlarning harakatchanligi $u=2,7 \cdot 10^{-5} \text{ sm}^2/\text{s}$. (1120 °C da) ga teng, bu miqdor $D=3,2 \cdot 10^{-5} \text{ sm}^2/\text{s}$ diffuziya koeffitsientiga to‘g‘ri keladi.

Bu tadqiqotlar kremniya misning diffuziya mexanizmi xuddi germaniydagidek ekanligini ko‘rsatadi.

6.6. Kremniya 3d-elementlarning diffuziyasi

Ma‘lumki, kremniy monokristalida kirishmalarning fazoviy taqsimoti uning elektrofizik hususiyatlarini shakllantirishda asosiy rol o‘ynaydi. Shuning uchun kremniydagi va umuman barcha yarimo‘tkazgichlardagi kirishmalar diffuziyasini o‘rganish shu kungacha yarimo‘tkazgichlar fizikasining dolzarb muammolaridan biri bo‘lib qolmoqda.

Bu bo‘limda kremniy monokristalida 3d o‘tish elementlarining diffuziya parametrlarini hisoblash haqida so‘z boradi. Ma‘lumki, bu elementlar kremniya asosan tugunlar orasi bo‘yicha diffuziyalanib, Si taqiqlangan sohasida chuqur energetik sathlar hosil qiladi, yaxshi eruvchan va diffuziya koeffitsientlari yuqori bo‘lib, temperaturaga

$$D=D_0 \exp(-E/kT) \quad (6.5)$$

ko‘rinishida bog‘langan, bu yerda D^0 — eksponenta oldi ko‘paytmasi, diffuziyani faollanish energiyasi.

Kremniya 3d — elementlar diffuziyasi ko‘p mualliflar tomonidan tadqiq qilingan, lekin ular tomonidan aniqlangan diffuziya koeffitsientlarining qiymatlari bir-biridan keskin farq qiladi. 6.3-jadvalda bu elementlar uchun D_0 va E kattaliklar hamda ularning orbital radiuslari va atom massalarining qiymatlari keltirilgan.

Ekspiriment natijalarini nazariy tahlil etish D_0 va E koeffitsientlarni

$$D_0 = A_1 + B_1 x + C_1/x, \quad (6.6)$$

$$E = \ln(A_2 x^2 + B_2 x + C_2), \quad (6.7)$$

ko'rinishlarda ifodalash mumkinligini ko'rsatadi, bu yerda $x=r/M$.

6.3-jadval. Kremniya 3d-elementlarning parametrlari.

parametrlar	Ti	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	manba
$R, \text{Å}$	1.48	1.24	1.28	1.23	1.18	1.14	1.13	1.06	
$M, \text{g/mol}$	48	52	55	56	59	59	64	65	
$D_0, \text{sm}^2/\text{s}$	$2 \cdot 10^{-5}$	10^{-2}	$2.6 \cdot 10^{-1}$	$7.2 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$2.3 \cdot 10^3$	$4 \cdot 10^{-2}$	10^{-1}	[1]
	$9 \cdot 10^{-3}$	$7.9 \cdot 10^{-4}$	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$9.7 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-4}$	-	-	[3]
E, eV	1.5	1.0	1.5	0.66	0.5	0.47	1.0	1.5	[1]
	2.05	0.81	0.63	0.68	0.37	0.47	0.18	-	[3]

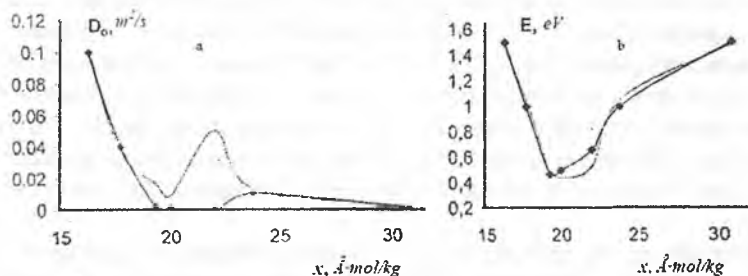
Eng kichik kvadratlar usuli yordamida aniqlangan A, B, C koeffitsientlarning hamda hisoblash aniqligini ko'rsatuvchi χ^2 ning qiymatlari 6.4-jadvalda keltirilgan.

6.4-jadval.

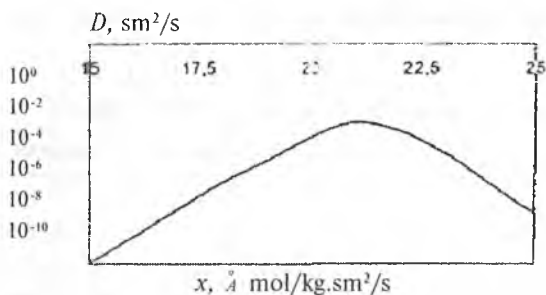
A_1	B_1	C_1	χ^2	A_2	B_2	C_2	χ^2
-6.8	0.15	56.45	10^{-3}	0.14	-6.98	63.56	10^{-3}

6.8-rasmlarda D_0 va E energiyaning x parametrga bog'lanishining nazariy va eksperimental natijalari grafigi keltirilgan. 6.8-a rasmdan ko'rib turibdiki, D_0 koeffitsient 2 ta ekstremumga ega. Ulardan birinchisi $x = 20$ ($r = 1,18 \text{ Å}$, $M = 59 \text{ g/mol}$) dagi minimum bo'lib, Co elementiga mos keladi, ikkinchisi esa $x = 23,8$ ($r = 1,24 \text{ Å}$, $M = 52 \text{ g/mol}$) dagi maksimum bo'lib, Cr elementiga ga mos keladi.

6.8-b rasmdan E koeffitsientning $x = 19,3$ ($r = 1,14 \text{ Å}$, $M = 59 \text{ g/mol}$) da minimumga ega bo'lishi va u Ni elementiga mos kelishi ko'rib turibdi.



6.8-rasm. D_0 (a) va E (b) larning $x=r/M$ ga bog'liqligi; nuqtalar — eksperimental natijalari, uzluksiz chiziq — hisoblash natijalari.



6.9-rasm. Diffuziya koeffitsienti D ning $x=r/M$ ga bog'liqligi.

(6.6) va (6.7) ifodalarni (6.5) formulaga qo'ysak, kremniya barcha 3d-elementlarining diffuziya koeffitsientlarining x parametrga bog'lanishini bitta formula bilan ifodalash mumkin ekanligi kelib chiqadi:

$$D = (A_1 + B_1x + C_1/x) / \sqrt{A_2x^2 + B_2x + C_2} \quad (6.8)$$

3d-elementlar uchun x parametr $\sim 15 \div 35$ oraliqdagi qiymatlarnigina qabul qila oladi. (6.8)-ifodaning bu oraliqdagi differensial tahlili $u \approx 21$ da ekstremumga ega bo'lishi va u C_0 ga mos kelishini ko'rsatadi (6.9-rasm).

Olingan natijalar [3, 6]-ishlarda keltirilgan natijalariga ancha yaqindir.

D_0 koeffitsientda ikkita, E va D koeffitsientlarda esa bittadan ekstremum nuqtalarning bo'lishi ularning elektron strukturasi bilan bog'liq ekanligini va ularni tadqiq etishni davom ettirish kerakligini ko'rsatadi.

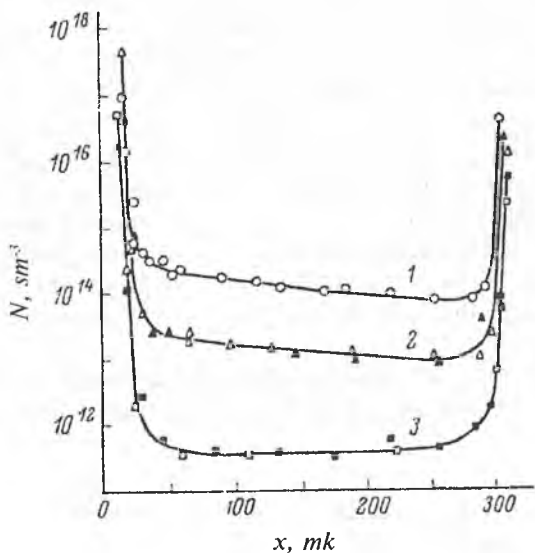
6.7. Kremniya tez diffuziyalanuvchi kirishmalar

Kremniya, germaniydek, diffuziyaning katta tezligi, litiy, misdan tashqari kumush, oltin, temir va ruxga ham xos, ular elektr xossalari ham ko'ra kremniya akseptor bo'ladilar. Temir guruhidagi boshqa elementlar ham katta diffuziya koeffitsientiga ega bo'lishini kutish mumkin. Kuyida shu paytgacha ma'lum bo'lgan eksperimental ma'lumotlar berilgan.

Kumushning kremniyadagi diffuziyasi Ag^{110} (kumush) izotopi yordamida nisbiy solishtirma qarshiligi 80 Om·sm ga teng p-turdagi monokristal namunalarda standart birin-ketin «qobiqeychish» uslubi bo'yicha tekshirilgan. Diffuzion qizdirish gely bilan to'ldirilgan kvarts ampulalarda o'tkazilgan. Kumush silliqlangan Si namunasi sirtlariga AgCl eritmasidan surtilgan.

Tadqiqotlarning ko'rsatishicha, kumush kremniya nisbatdan katta diffuziya tezligiga ega ekan. $1100 \div 1350$ °C oraliqida Ag ni diffuziya koeffitsienti $3 \cdot 10^{-9}$ sm^2/s dan $2,4 \cdot 10^{-8}$ sm^2/s ga o'zgaradi.

Birinchi marta oltinning kremniydagi diffuziyasini Strazers va keyinroq G.S. Kulikov va R.Sh. Malkovch o'rganishgan. Keyinchalik bu masalaga katta e'tibor berila boshlanishi faqatgina oltinning tekshirishlar uchun qulay ob'ekt sifatida qo'llanilishigina emas (katta nisbiy aktivlik va yarim parchalanish davrining Au¹⁹⁸ izotopi uchun uncha kichik emasligi), balki uning yarimo'tkazgichli elektronikada kremniyda asosiy bo'lmagan zaryad tashuvchilar yashash davrini kamaytirish uchun asosiy kirishma sifatida qo'llanilishi bilan ham bog'liq.



6.10-rasm. Kremniyda oltin atomlarining taqsimoti.

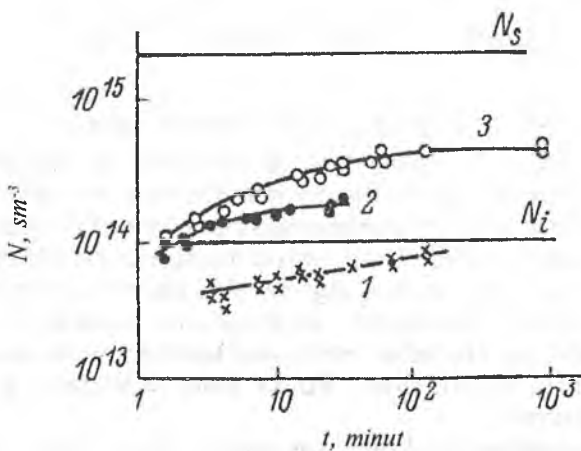
Tajribada olingan oltinning zichligi taqsimoti. odatda, murakkab xarakterga ega (6.10-rasm). Bunda namunaning sirt oldi sohasida kuzatilayotgan oltin atomlari zichligining keskin ko'tarilishi yuzaga ishlov berish sifatiga bog'liq. Silliqlangan sirtli-namunalarda sirt oldi sohalarida zichlik sayqallashgan sirtli namunalarga nisbatan 100 marta ortiq. Oltinning diffuziya kinetikasiga kremniyni legirlanganlik xarakteri ham ta'sir ko'rsatadi, bunda bor (B) bilan legirlangan kovakli kremniyda diffuziya tezligini o'zgarishi kuzatilmaydi. Fosfor bilan legirlangan kremniyda diffuziya sekinlashadi.

Strazers tomonidan temirning kremniydagi diffuziyasi tekshirilgan. Tajribalar 1100 ÷ 1250 °C oraligida Fe⁵⁹ radioaktiv izotop yordamida monokristal namunalarda o'tkazilgan.

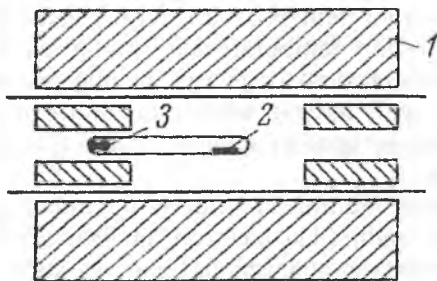
Kollinz va Karlsonning aniqlashicha, kremniyda temirning diffuziyasi ikki xil diffuziya koeffitsienti bilan xarakterlanadi. 1115 °C da «tez» diffuziya koeffitsienti $5 \cdot 10^{-6} \text{ sm}^2/\text{s}$ dan yuqori bo‘ladi, «sekin» diffuziya o‘sha temperaturada $7 \cdot 10^{-7} \text{ sm}^2/\text{s}$ ga teng. Bunda temir donorli kirishma bo‘ladi. Nikel va kobalt esa akseptorlik xossalriga hamda, yuqori diffuziya koeffitsientlariga ega.

Oltin va temirning kremniyda diffuziyasi germaniydagiga nisbatan ancha tezroq bo‘lishi e‘tiborga loyiqdir. Bu ayniksa, oltinga taaluqli, uning kremniyda diffuziyasi faollashish energiyasi germaniydan 2,5 marta kamroqdir (1,1 va 2,48 eV). 925 °C da (bu germaniy erish temperaturadan 33 °C ga past) oltinning germaniydagi diffuziya koeffitsienti $9 \cdot 10^{-9} \text{ sm}^2/\text{s}$ teng, shu temperaturada kremniyda esa (kremniy suyulish temperaturasida 500 °C past) oltinning diffuziya koeffitsienti $2 \cdot 10^{-8} \text{ sm}^2/\text{s}$ ga teng. Oltin diffuziyasi dissotsiativ mexanizm orqali amalga oshadi. Oltin atomlari panjaraning tugunlar oralig‘i bo‘ylab tez harakatlanadi va vakansiyalarda o‘tirib qoladi. Oltinning Si da diffuziyasi mexanizmining xususiyati uning effektiv eruvchanligi na‘munaning diffuzion to‘yinish vaqtiga bog‘liqligi bilan belgilanadi (6.10-a rasm). To‘yinish vaqti ortishi bilan effektiv eruvchanlik ortadi. Bu oltin atomlarining o‘rin almashinishi holatiga o‘tishi bilan bog‘liq.

Germaniydan farqli o‘laroq, kremniyda tez diffuziyalanuvchi akseptor kirishma bo‘lib rux ham ishlatiladi. Kremniyda ruxning diffuziyasi Fuller



6.10-a rasm. Kremniyning turli dislokatsiya zichliklarida oltin konsentratsiyasining vaqtga bog‘liqligi



6.11-rasm. Kremniya rux diffuziyasini o'rganish bo'yicha tajriba sxemasi; 1 — temperatura gradientli pech, 2 — kremniy namunasi, 3 — rux bo'lagi.

va Morin tomonidan chuqur o'rganilgan. Ular tajribasida $\sim 1,0 \times 0,4 \times 0,06 \text{ sm}$ o'lchamli ingichka plastinka ko'rinishida tayyorlangan kremniy namunalari rux bug'larida 900°C dan 1360°C gacha isitilgan. Rux miqdori shunday tanlanganki, diffuziya temperaturasida rux bug'lari $0,5 \div 1,5 \text{ atm}$ bosim ostida bo'lgan. Ba'zi tajribalarda bug' bosimi trubkada temperatura gradientini yaratish uchun o'zgartirib turilgan, trubkada kremniy va rux bo'lagi joylashtirilgan (6.11-rasm).

Biroq, bu tajribalarda natijalardagi farqni bosim 7 dan 760 mm.sim.ust. oralig'ida o'zgarganda ham aniqlash imkoni bo'lmadi.

D ning qiymati quyidagi formula bilan aniqlandi:

$$D = \frac{(fd)^2}{5,4t} \quad (6.5)$$

Bunday hisob uchun namunaning o'rtacha qarshiligiga to'g'ri keluvchi harakatchanlik kattaligidan foydalanilgan. Ruxning to'liq ionlanishini ta'minlash uchun, margumush bilan legirlangan n -turdagi kremniy namunalari qo'llanilgan. Uning miqdori — rux bilan to'yingandan keyin namuna n -turdagi o'tkazuvchanlikni saqlab qolish uchun yetarli qilib olingan.

Ruxning kremniydagi diffuziya koeffitsientining olingan barcha qiymatlari $10^{-6} \div 10^{-7} \text{ sm}^2/\text{s}$ oraligida yotadi. Xuddi shu qiymatlar ruxning kremniydan bug'lanishini tekshirishda, shuningdek elektr maydoni ta'sirida zarralar ko'chishi tajribalarida ham olingan.

Bir xil temperaturada qizdirilgan turli namunalarda diffuziya koeffitsienti uchun ma'lumotlarning bir-biridan katta farqini ham aytib o'tish lozim. Misning germaniydagi diffuziyasida ham shunday holat o'rinalidir va bu holat namunalardagi dislokatsiyalar zichligi bilan ham bevosita bog'liq holda bo'lishligi aniqlangan.

Rux va temir guruhi elementlarining diffuziya koeffitsientlarining katta qiymatlari tekshirilgan temperaturalar oralig'ida bu elementlarning diffuziyasi tugunlarora xarakteriga ega ekanligiga asos beradi. Bunday temperaturalarda aytib o'tilgan elementlar atomlari tugunlar oralig'ida ionlashgan holatda bo'lganligi sababli, ular o'zlarini donorlar sifatida ko'rsatishlari lozim.

Masalan, ruxning kremniyda diffuziya holatida ikki marta ionlashgan donorlik energetik sathi (ikki elektron ajralishi sababli) paydo bo'lishi kerak. Biroq, tajribada aniqlanishicha, past (va xona) temperaturalarida rux kremniyda ikkita akseptorlik sathini hosil qiladi, bu esa faqat rux atomlarining tugunlar oralig'idan tugunlarga o'tishi va diffuziyaning dissotsiativ mexanizmi sababli ro'y berishini taqozo qiladi.

Bu yerda ko'rib chiqilgan ko'p zaryadli akseptorlarning diffuziya mexanizmini tushuntirish uchun III — V guruh elementlari kirishmalari bilan legirlangan kremniy namunalarda past temperaturalarda ularning diffuziyasini tekshirish qiziqarli bo'lar edi. Bu elementlar va ko'p zaryadli akseptorlar o'rtasidagi o'zaro ta'sir komplekslar hosil qilishga olib keladi va diffuziya tezligi, eruvchanlik, shuningdek ushbu namunalarda tok tashuvchilarining tarqalish xarakteri o'zgarishiga olib keladi. Oxirgi vaqtlarda bunday tekshirishlar kirishmalarning kremniyda eruvchanligini aniqlash uchun bajarilgan.

6.8. Doimiy elektr maydonining oltin va kumush atomlarining kremniydagi diffuziyasiga ta'siri

Doimiy tashqi elektr maydon bo'lganda yarimo'tkazgichlarda aralashma zarrachalariga faqatgina $F_1 = qE$ kuch emas, balki elektronlarni hamda kovaklarni ionlarda sochilishiga sabab bo'luvchi elektrodlar tomonga harakatlantiruvchi kuch ham ta'sir etadi. F_2 kuch aralashma zarrachalarini elektron va kovakning harakat yo'nalishida ergashtiradi.

Bu effekt nazariyasi erkin elektronlarni yaqinlashishida Fiks tomonidan ko'rib chiqilgan. Tashqi elektr maydon yo'qligida elektronlarni kristalda taqsimlanishi (koordinata va impuls bo'yicha) izotrop va shuning uchun ionga elektron tomondan ta'sir etuvchi kuch nolga teng. Qachonki, E tashqi elektr maydon qo'yilganda, elektronlar $t = l_n / v$ vaqt davomida tezlashadi, (l_n — erkin yugurish yo'li, v — elektronlarni o'rtacha issiqlik tezligi) va qo'shimcha impulsiga ega bo'ladi:

$$\Delta P = q_0 E l_n / v. \quad (6.6)$$

Tahminan, elektron ion bilan to'qnashganda unga bu qo'shimcha

impulsni to'raligicha beradi.

Fiks, elektron tomonidan ionga ta'sir etuvchi F_2 kuch uchun keyingi ifodani oldi:

$$F_2 = q_0 E n l_n \sigma_m. \quad (6.7)$$

Bu yerda: n — elektronlar konsentratsiyasi, σ_m — elektronlarni ionlarda o'rtacha sochilish kesimi. Ionga ta'sir etuvchi natijaviy kuch u holda quyidagiga teng bo'ladi

$$F = F_1 + F_2 = q_0 E (1 \pm n l_n \sigma_m). \quad (6.7-a)$$

Bu yerda: $q_{eff} = q_0 (1 \pm n l_n \sigma_m)$ — tashqi elektr maydoni bo'lgandagi kristalda harakatlanayotgan ionni effektiv zaryadi. U holda manfiy ionlar kuchi, elektronlar tomonidan ta'sir etuvchi kuch, elektr maydoni tomonidan ta'sir etuvchi kuch yo'nalishi bilan to'g'ri keluvchi kuchlar yig'indisi musbat ionlarni chiqradi.

(6.7-a) formuladan natijaviy harakatchanlik uchun quyidagi ifodani olish mumkin:

$$U_{eff} = U_0 (1 \pm n l_n \sigma_m). \quad (6.8)$$

Bu yerda U_0 — ergashtirish effekti yo'qligida ionlarni harakatchanligi. (6.8) formula ko'rsatadiki, kationlar uchun $n l_n \sigma_m \leq 1$ bo'lganda $U_{eff} \approx \mu_0$. Agarda $n l_n \sigma_m$ o'sib borsa, birga yaqinlashsa, unda U_{eff} yo'qoladi va $n l_n \sigma_m = 1$ da $U_{eff} = 0$ bo'ladi. $n l_n \sigma_m > 1$ da kation elektronlar tomonga ergashib harakat qiladi.

Yarimo'tkazgichlarda aralashmali o'tkazuvchanlik bo'lganda, ergashtirish faqat elektronlar nilan emas, kovaklar bilan ham bo'ladi

$$q_{eff} = q_0 (1 \pm n l_n \sigma_m \pm p l_p \sigma_{ip}), \quad (6.9)$$

$$U_{eff} = U_0 (1 \pm n l_n \sigma_m \pm p l_p \sigma_{ip}). \quad (6.10)$$

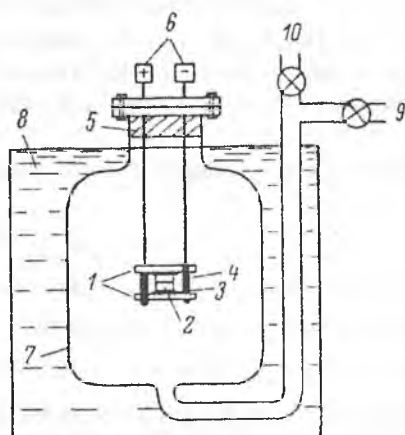
Bu yerda: p, l_p — mos ravishda kovaklar konsentratsiyasi va erkin yugurish yo'li, σ_{ip} — kovaklarni ionlarda o'rtacha sochilish kesimi. Qavsdagi yuqoridagi ishora musbat ion uchun, pastdagisi manfiy ionlar uchun.

Neytral atomlar tashqi elektr maydonda diffuziya bo'lganda anodga, kovaklar katodga ergashtiradi va natijaviy harakatchanlik quyidagicha aniqlanadi.

$$U_{eff} = U_0 n l_n \sigma_m \text{ yoki } U_{eff} = U_p n l_p \sigma_{ip}.$$

Shunday qilib, ionlar harakatchanligi ishorasi va qiymati tajribada (6.8) formula bilan aniqlanadi. Aralashmali o'tkazuvchanlik atrofida ayniqsa tok tashuvchilarning katta konsentratsiya va katta harakatchanlikka ega

bo'lgan yarimo'tkazgichlarda effektiv zaryad (harakatchanlik) temperatura bilan sezilarli o'zgarishi mumkin, bazi hollarda esa hatto ishorasini ham o'zgartirishi mumkin. Kerakli sharoitlarda aralashma zarrachalari kinetik energiyasi, potensial to'siqni yengishga va qo'shni bo'sh muvozanat holatga o'tishga yetarli bo'ladi. Bunday aktiv zarrachalar maydon ta'sirida muvozanat holatdan chiqib elektron (kovak) ga ergashib ketadi. Normal ion panjarada ion muvozanat holatdan biroz kichik tebranma harakatda bo'ladi, Unga ta'sir etuvchi natijaviy kuch 0 dan farqli bo'lganda ham muvozanat holatdan ketmaydi.



6.12-rasm. Yarimo'tkazgichlarda kirishmalarning elektr maydonida ko'chishini o'rganish qurilmasi.

- 1 — Zanglamaydigan po'latli elektrod, 2 — namunalar, 3 — tantall plastinka, 4 — izolyatsiyalovchi vtulkalar, 5 — mis qobiq, 6 — tok o'tkazuvchilar, 7 — shisha idish, 8 — suv. 9 — so'rib olish nayi, 10 — geliyni kiritish nayi.

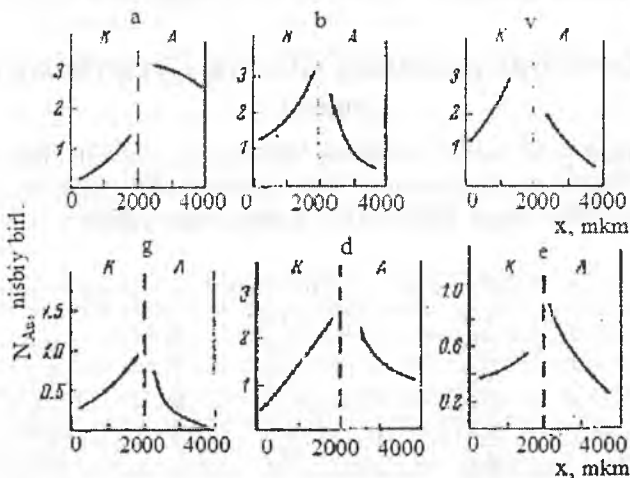
Yarimo'tkazgichlarda tez diffuziyalanuvchi kirishmalar harakatini elektr maydon yordamida ham boshqarish mumkin. Buning uchun kirishmalarning ionlanish xarakterini turli temperaturalarda bilish zarur.

G.S.Kulikov, R.Sh.Malkovich va Syue Shin tomonidan doimiy elektr maydonning oltin va kumushning kremniydagi diffuziyasiga ta'siri tekshirilgan. Tajribalar yuqori temperaturalarda oltin uchun $1075 \div 1350^{\circ}\text{C}$ da, kumush uchun $1280 \div 1350^{\circ}\text{C}$ da o'tkazildi. Tajribalar uslubi quyidagidan iborat bo'lgan. Ikkita yassi parallel kremniy namunalari har birining o'lchami $5 \times 5 \times 2\text{mm}$ bo'lib kremniyning bitta quymasidan qirqib olingan. Ular maxsus ramkada bir-biriga, oldindan oltin yoki

kumushning radioaktiv izotopi surtilgan silliqqlangan yuzalari bilan qisilgan. Ramka qisib olingandan keyin gely bilan to'ldirilgan shisha kolbachaga joylashtiriladi. Tashqaridan kolba oqib turgan suv bilan sovutiladi (6.12-rasm). Ramkaning tok olib keluvchi elektrodlari va tekshirilayotgan namunalar o'rtasiga tantalli lentadan ingichka prokladkalar joylashtiriladi. Ular elektrodlarning bog'lovchisi bo'lib xizmat qiladi, ba'zi tajribalarda shuningdek temperaturani tenglash uchun xizmat qiluvchi kremniyli plastinkalar ham qo'llaniladi. Namunalarni qizdiruvchi elektr maydonni hosil qilish uchun namunalar orqali doimiy tok bilan o'tkaziladi. Namunalar temperaturasi optik pirometr yordamida sovituvchi suv va kolba shishasini nurlanishni yutish tuzatmalarini e'tiborga olgan holda o'lchanadi. Elektr maydonining quvvati namuna orqali o'tkazilgan tok kattaligi va namunaning nisbiy qarshiligi ko'rsatkichi bo'yicha hisoblanadi. Elektr maydoni yordamida ko'chirishdan keyin tantalli prokladkalar aktivligi va namuna qalinligi bo'ylab kirishma atomlar taqsimlanish zichligi o'lchanadi.

Kremniya oltinning elektr maydonida ko'chishi. 6.5-jadval.

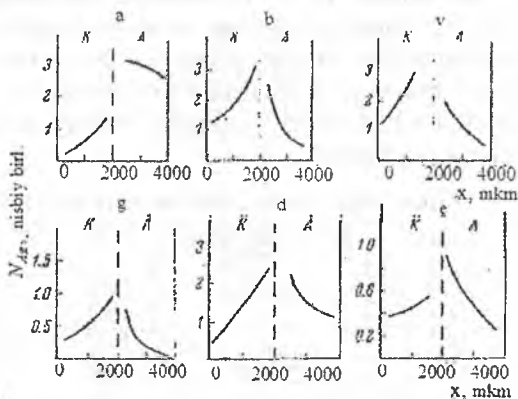
$T, ^\circ\text{C}$	T, soat	O'tish yo'nalishi	$T, ^\circ\text{C}$	T, soat	O'tish yo'nalishi
1075	17.37	Katodga	1250	7.0	Anodga
1125	17.0	»	1300	6.42	»
1150	12.0	»	1320	2.66	»
1250	22.0	Anodga	1350	2.72	»



6.13-rasm. Kremniya oltinning elektr maydonida ko'chishi.

Tadqiqotlarning ko'rsatishicha, (6.5-jadval va 6.13-rasm), 1200 °C dan yuqori temperaturada oltin anodga, past temperaturada katodga yo'naladi. Kumush 1280 ÷ 1350 °C oraliqda katodga yo'naladi (6.14-rasm). Haqiqatda, kutilganidek, yuqori temperaturalarda oltin va kumush kremniy kristal panjarasining tugunlar oralig'i bo'ylab musbat ionlar ko'rinishida harakatlanadi.

Ajablanarlisi shuki, oltin 1200 °C dan yuqori temperaturalarda anod tomonga o'tadi. Bunday kichik temperatura intervalida u o'z zaryadini «+» dan «-» ga o'zgartirishini tasavvur qilish qiyin. Keyingi tekshirishlar aniqlashicha, oltinning anodga yo'nalishi elektronlar buluti bilan oltin ionlarini ergashtirish effekti bilan yuzaga keladi. Uning nazariyasi yuqorida bayon qilingan.



6.14-rasm. Kremniyda kumushning elektr maydonida ko'chishi.

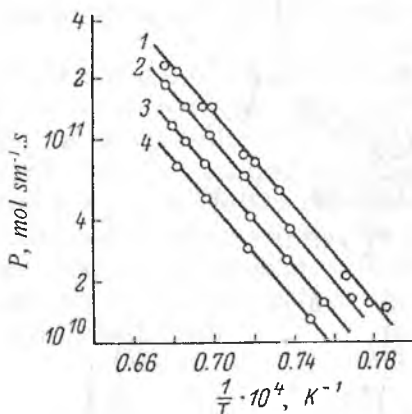
6.9. Kremniyda gazlarning diffuziyasi, eruvchanligi va singishi

Kremniyda geliy va vodorodning diffuziyasi, eruvchanligi, singishi Virigen va Varmolts tomonidan mass-spektrometrik analiz yordamida tadqiqlangan. Ular olgan natijalar 6.6-jadvalda keltirilgan.

6.6-jadval.

T, °C	D · 10 ⁶ , sm ² /s	S · 10 ⁻¹⁶ , sm ⁻³	P · 10 ⁻¹⁰ , sm ⁻¹ · s ⁻¹
1092	1.70	3.4	6.7
1115	1.80	4.1	7.4
1127	1.80	4.7	8.4
1132	1.76	6.4	9.4
1195	2.23	9.8	21.9
1199	2.30	10.0	23.0
1200	2.17	11.2	24.3

Geliyning kremniydagi diffuziyasining aktivlashish energiyasi 1,26 eV. Shu energiyaning germaniydagi kattaligidan ancha yuqori (0,7 eV). Shu bilan bir vaqtda geliyning kremniyda erish issikligi (0,48 eV), germaniydagidan (0,57 eV) bir muncha kam.



6.15-rasm. Kremniyda vodorod atomlarining eruvchanligi.

Kremniy panjarasida vodorod N_2 molekula ko‘rinishida bo‘ladi va qisman, u yerda mavjud bo‘lgan kislorod bilan bog‘liq bo‘lish ehtimoli bor. Kichik temperatura sohasida vodorod kremniyda tok tashuvchilarni bermaydi. Vodorodning kremniyda turli temperaturalarda eruvchangligi haqidagi ma‘lumotlar 6.15-rasmda berilgan.

Neon, argon va azotning kremniyda singishi uncha katta emas: 1200 °C da $-5 \cdot 10^8 \text{ sm}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

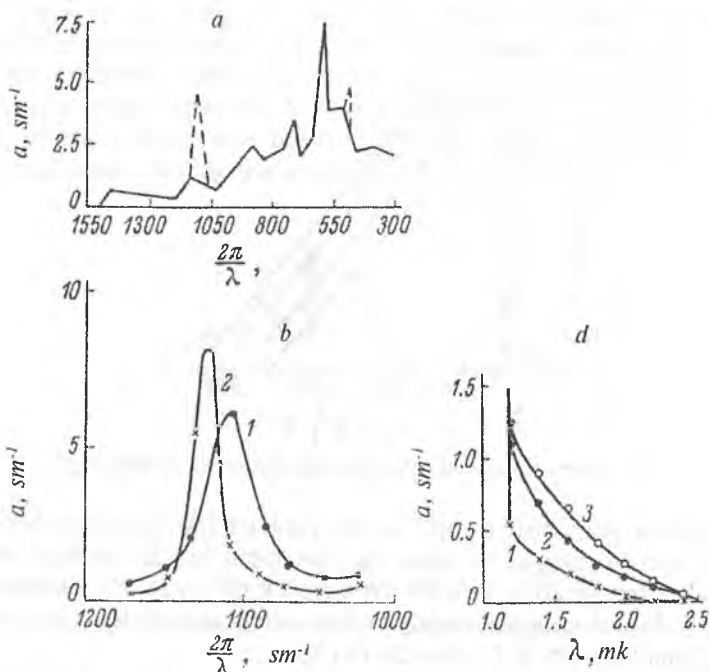
Kremniy namunasida gazlarning katta miqdori borligi mass-spektroskopik analizlar va boshqa tekshirishlarda o‘z tasdig‘ini topgan. Masalan, Papazyan va Volskiy germaniy va kremniy namunalarida turli gazlarning zichliklari uchun olgan ma‘lumotlar 6.7-jadvalda keltirilgan.

6.7- jadval.

Element	H	O	C	N
Ge	$2.5 \cdot 10^{18}$	$3.6 \cdot 10^{18}$	$2.3 \cdot 10^{18}$	yo‘q
Si	$1.7 \cdot 10^{19}$	$1.5 \cdot 10^{19}$	$1 \cdot 10^{18}$	»

Kremniy quyimasida katta miqdorda kislorodning borligi-o‘ziga xos bo‘lgan bu kristallarda yorug‘lik yutish soxalari hosil bo‘lishiga olib keladi: to‘lqin spektri kremniy uchun taxminan 9 mk, germaniy uchun 11,6 mk uzunligiga mos bo‘ladi. Kayzer va Kek, shuningdek Smakula va

Kalnayslarning ko'rsatishicha, yutishning optik koeffitsienti kattaligi 9 mk da o'lchanganda kremniyning turli namunalarda bu kattalik kislorod miqdoriga bog'liq holda o'zgaradi (6.16-rasm).



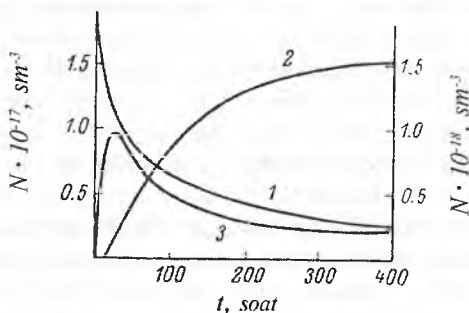
6.16-rasm. Kremniyda infraqizil nurlanishning yutilishi.

Logan va Peters kislorodning kremniydagi diffuziyasini o'rganganlar. Kremniyни kislorod atmosferasida qizdirishdan keyin hosil bo'lgan diffuzion qatlam qalinligini aniqlash uchun, ular ikki usuldan — kremniyda kimyoviy yedirilish chuqurchalarini kuzatish va qo'shimcha termik ishlovdan keyin diffuzion qatlamning elektrik xossalarini tekshirish usullaridan foydalandilar.

Birinchi usul — dislokatsiyalarning chiqish joyi bo'lganyedirish chuqurchalarining o'lchamlari namunadagi kislorod miqdoriga bog'liqligi aniqlangan. Kislorod qancha ko'p bo'lsa, chuqurchalar o'lchami shuncha kichik bo'ladi, kristal yuzasida bir vaqtdayedirishning faqat bir uslubida hosil bo'lgan chuqurchalar bo'ladi. Kremniy namunalari kislorodda yoki vakuumda qizdirib, kislorod bilan to'yingan yoki siyraklashgan qatlamlar hosil qilishga erishildi, ularning qalinligini yedirish chuqurchalarining o'lchami o'zgarishi bo'yicha aniqlash mumkin.

Ikkinchi usul kremniyga termik ishlov berish vaqtida maxsus effektlar yuzaga kelishi bilan bog'liq, kremniyni past temperaturada qizdirish ($300 \div 600 \text{ }^\circ\text{C}$) namunalarning elektron o'tkazuvchanligining ortishiga olib keladi. Bunda elektronlar zichligi kislorod ko'p bo'lgan sharoitda tayyorlangan namunalarda ko'proq (kvarsli, kislorodli muhit) va kislorod yo'q sharoitda olingan namunalarda kamroq bo'ladi (vakuum, vodorod atmosferasi).

Kremniyda kislorod diffuziyasini tekshirishda termokonversiyani kuzatish uslubi bo'yicha p -turdagi kremniy namunalari kislorod atmosferasida diffuzion qizdirilib yukori temperaturada va keyin qo'shimcha ravishda $450 \text{ }^\circ\text{C}$ da isitilgan. Ko'shimcha isitish yuzada n -turdagi kremniy qatlam hosil bo'lishiga olib kelgan, uning chuqurligini temperatura va diffuzion qizdirish vaqtiga bog'liq bo'lib, termozond, oltinni cho'ktirish yoki boshqa uslublar yordamida aniqlash mumkin. Kremniyda kislorodning diffuziya tezligi bu o'lchashlarga binoan $1300 \text{ }^\circ\text{C}$ da $1,8 \cdot 10^{-10} \text{ sm}^2/\text{s}$ ni tashkil qiladi.



6.17-rasm. Kislorod, SiO_2 , SiO_4 larning konsentratsion egri chiziqlari.

Kayzer, Frish va Rays kislorod-Si qattiq eritmasining parchalanishini tekshirish orqali kremniyni past temperaturalarda termaishlov berishda termodonorlar hosil bo'lish tushuntirdilar. Si kristall panjarasida joylashgan kislorod issiqlik ishlov vaqtida diffuziya natijasida ma'lum bir nuqtalarda to'planadi. (masalan, dislokatsiyalarda, SiO_2 , SiO_4 , $(\text{SiO}_2)_n$ ko'rinishdagi atomlar agregatlari). Taxmin qilinadiki, kristalning donorlik xossalari asosan SiO_4 komplekslari asosida bo'ladi, $(\text{SiO}_2)_n$ kirishmalar esa elektr noaktiv holatda bo'ladi. SiO_4 komplekslar parchalanuvchi qattiq eritmalarning oraliq holati bo'lganligi bois, ular donorlar zichligi termoishlov vaqtiga bog'liq.

6.10. Germaniy va kremniyda kirishmalarning diffuziya mexanizmidagi ba'zi farqlar to'g'risida

Kremniy va germaniy bir xil tuzilishli va fizik-kimyoviy xossalari bir-biriga juda o'xshash bo'lgan yarimo'tkazgich elementlar bo'lgani uchun, ularda kirishma atomlar diffuziyalarining ham to'liq o'xshashligi bo'lishi kerakdek tuyuladi. Ammo, bunday emas. Masalan, agar germaniyda V guruh elementlari — donorlar III guruh elementlariga nisbatan, deyarli ikki tartibga tez diffuziyalansa, kremniyda esa buning aksi: V guruh elementlari (donorlar) III guruh (akseptorlar) elementlariga nisbatan bir-ikki tartibga sekinroq diffuziyalashadi. Ba'zi kirishma elementlari (masalan, oltin va rux) kremniyda germaniyga nisbatan tezrok diffuziyalanadi, shu vaqtning o'zida kremniyda atomlararo bog'lanish mustahkamligi germaniyga qaraganda yuqoriroq.

Germaniy va kremniyda turli elementlar diffuziyalari tezliklari orasidagi bunday nomutanosiblik, Svelinning ko'rsatishicha, germaniy va kremniydagi vakansiyalar holatlaridagi birmuncha farqlar mavjudligidandir.

Vakansiyalar kremniy ham germaniyda ham akseptorlardir. Biroq, germaniyda vakansiyalarning akseptorlik sathi man qilingan soxaning pastki yarmida valentli sohadan o'rtacha 0,26 eV yuqorida joylashgan, kremniyda esa u man qilingan sohaning yuqori yarmida o'tkazuvchan soha tubidan 0,16 eV pastda joylashgan. Shuning uchun bir xil temperaturalarda germaniyda kremniydan ko'ra ko'prok zaryadlangan vakansiyalar bo'ladi. Bu germaniy va kremniydagi diffuziya mexanizmlariga o'ziga xoslik beradi. Yuqorida aytib o'tilganidek III va V guruh elementlari uchun ularning vakansiyalar bo'ylab harakatlanishiga ta'sir qiladi. Germaniyda bu holda zaryadlangan kirishma atomlar va zaryadlangan vakansiyalar o'rtasida elektrostatik o'zaro ta'sirlashuv o'rinnidir, bunda musbat zaryadli kirishma ionlar manfiy zaryadlangan vakansiyalarga tortiladi. Bu ularning harakatlanishini yengillashtiradi, manfiy kirishma ionlar itariladilar, bu ularning kristal bo'ylab harakatini qiyinlashtiradi. Kremniyda ko'pchilik vakansiyalar neytral holatda bo'ladilar va ular bilan kirishma ionlar o'rtasida elektrostatik kulonli o'zaro ta'sir bo'lmaydi.

Germaniy va kremniyda donor va akseptor elementlarning diffuziya koeffitsientlarining qiymatlarini baholash uchun 3-4 bobdagi formulalardan foydalanamiz.

6.8-jadvalda V va III guruh elementlarning akseptor va donor

holatlaridagi ion radiuslari keltirilgan, shuningdek $\Delta H_s \approx \frac{6\pi(r_s - r_s^*)^2 r_s^*}{Z(1+\alpha)\chi}$

formuladan topilgan germaniy va kremniy uchun ΔH qiymati.

Germaniy va kremniyning ionli radiusi uchun 1.22 va 1.17 Å qabul qilingan.

6.8-jadval. V va III guruh elementlarning akseptor va donor holatlaridagi ion radiuslari

6.8-jadval.

Ion			
B ⁻	0.75	7.0	6.7
Al ⁻	1.74	7.5	10.3
Ga ⁻	1.58	3.0	4.2
In ⁻	1.68	3.8	6.3
Te ⁻	1.64	3.5	6.0
P ⁺	0.77	4.0	3.8
As ⁺	0.96	1.5	1.1
Sb ⁺	1.19	0	0
Bi ⁺	1.32	0.1	0.2

Zaryadlangan vakansiyalar va ionlar o'rtasidagi kulonli o'zaro ta'sir

$\Delta U_c = \pm \frac{q_v q_i}{\chi d}$ formuladan kelib chiqqan holda germaniy uchun $\pm 0,36\text{eV}$

($\chi=16$), kremniy uchun $\pm 0,46\text{eV}$ ($\chi=12$). $\mu - E_v$ qiymati germaniy uchun $0,05\text{ eV}$ kremniy uchun $0,29\text{ eV}$.

$$D = \frac{1}{8} a^2 v \exp\left(\frac{\Delta S_v + \Delta S_f}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_v + \Delta U_s + \Delta U_f}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]$$

$$\frac{D_i}{D_{sd}} = \exp\left(-\frac{\Delta U_c}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]$$

formulalardan foydalanib va ΔH_v , ΔH_f va $\mu - E_v$ qiymatini qo'yib D_i/D_{sd} ni germaniy va kremniyda turli elementlarning diffuziyasi uchun hisoblab topish oson.

D_i/D_{sd} ning hisoblangan va tajribalarda aniqlangan qiymatlari.

6.9-jadval.

Tur	Kirishma	Hisob	Tajriba	Tur	Kirishma	Hisob	Tajriba
Germaniy(800 ^o C)				Kremniy(1200 ^o C)			
p	Al	5	0.2	n	Bi	1	1
	Ga	4	1		Sb	1	1
	In	6	2		As	1.5	2
	B	15	3	p	In	1.2	5
n	P	580	45		Tl	1.2	5
	Bi	90	130		B	1.8	15
	Sb	90	130	n	P	4.0	15
	As	180	230	p	Ga	0.8	20
					Al	9	70

Olingan natijalar 6.9-jadvalda keltirilgan. O'sha yerda bu kattaliklarning tajribaviy qiymatlari ham berilgan.

Akseptor xarakterli kirishma va asosiy moddaning ion radiuslarida ancha katta farqlar, donor va asosiy moddaga nisbatan (kremniy va germaniy), akseptorlarning donorga qaraganda diffuziya tezligining yuqori bo'lishiga olib kelishi kerak. Kremniyda kuzatilishicha, buyerdagi jarayon ionlar va zaryadlangan vakansiyalar o'rtasida elektrostatik o'zaro ta'sir bilan hisoblanmaydi (chunki $\mu - E_v < 0$). Germaniyda esa bu ta'sir diffuziya tezligi ortishiga olib keladi. Donorlar uchun kattaroq ($\Delta H_c < 0$) va akseptorlar uchun kichikroq ($\Delta H_c > 0$).

D_i/D_{os} ni topishda germaniy uchun shuningdek, kirishma ionlari va vakansiyalar orasida kulonli o'zaro ta'sir ham inobatga olingan, chunki $\mu - E_v > 0$ oqibatida vakansiyalarning asosiy qismi zaryadlangan.

Yuqorida bayon qilinganlar nega Si da akseptor kirishmalar donorga nisbatan tezroq diffuziyalanishi, shu vaqtning o'zida Ge da buning aksi bo'ladi degan savolga javob beradi.

6.11. Kremniyda termik nuqsonlar

Kremniyni qayta ishlashda yuzaga keluvchi termik nuqsonlarni (TN) o'rganishga bir qator tajribaviy ishlar bag'ishlangan. Ularning ko'pchiligida TH izolyatsiyalangan nuqtali nuqsonlar sifatida emas, balki donor turidagi komplekslar sifatida ifodalanadi. Bunday donorlar Si ga kristallni 350 °C dan 1300 °C gacha oraliqda ishlov berishda kiritilishi mumkin. Kremniy kristallarida taxminan 10^{16} sm^{-3} gacha miqdordagi donorli markazlar 350 — 500 °C gacha termik ishlovda yuzaga keladi. Kayzerning optik va elektrik usullar bilan ko'rsatishicha, TN lar miqdori kristaldagi kislorod miqdoriga bog'liq bo'lib, uning ortishi bilan zichlik ham ortadi. Bunda TN o'z tarkibiga binoan SiO_4 turidagi komplekslarni namoyon qiladi deb taxmin qilingan.

Boshqa tomondan, ba'zi ishlarda kislorodning TN xossalariga bo'lgan ta'sirini inkor kiluvchi natijalar ham keltiriladi. Masalan, Bemski va Dias Sini 600 °C dan 800 °C gacha qizdirishda yuzaga keluvchi TN zichligi kremniyni eritmadan tortish yo'li bilan va zonali suyultirish texnikasi yo'li bilan olingan boshlang'ich kristallardagi miqdoriga bog'liq emasligini ko'rsatib berdilar. Shunday qilib, TN tabiatini hali yana o'rganish zarur. Jumladan, yuqori temperaturada yuzaga keluvchi komplekslarning vakansiyalar yoki boshqa nuqtaviy nuqsonlar bilan o'zaro ta'siri haqidagi

masala ham o'z yechimini kutmoqda.

TN hosil bo'lish energiyasi miqdorini tajriba sharoitida ba'zi ishlarda TN zichligining termik ishlovdan keyin chiniqtirish tezligiga ham bog'liqligi aniqlandi.

Turli mualliflar ma'lumotlariga ko'ra TN larning faollanish energiyasi $E_0 = 2,5 \div 1,8$ eV ga teng. Bunda ye_0 kristalni kirishma bilan legirlash darajasiga bog'liq bo'lib, uning ortishi bilan kamayadi. TN $300 \div 1025$ °C temperaturalarda qizdirilganda ularni zichligi xona temperaturasidan ancha yuqori temperaturalarda yuz berishi kuzatildi. TN quydirishni temperaturaga bog'ligi chizmalaridan ularning migratsiya energiyasi miqdori hisoblab chiqildi. E_M kristaldagi dislokatsiyalar zichligiga bog'liqligi va $E_m = 0,6$ eV da dislokatsiyalar zichligi 10^4 sm^{-2} dan yuqori bo'lishi aniqlandi. Mualliflar fikricha, TN vakansiyalar guruhidan iborat. Bemski va Dias TN larga xona haroratida issiqlik ishlo7 berishni ta'sirini kuzatdilar. TN zichligining vaqt bo'yicha o'zgarish chizmalaridan $E_M = 0,3$ eV ekanligi aniqlandi va xona temperaturasida TN diffuziya koeffitsienti hisoblab chiqildi: $D \approx 1,2 \cdot 10^{-7} \text{ sm}^2/\text{s}$ va u kristaldagi kislorod miqdoriga bog'liq emas ekanligini ko'rsatdilar. Mualliflarning ta'kidlashicha, TN tugunlararo atomlarga xos nuqsonlar turidir. Svenson ma'lumotlariga ko'ra TN migratsiya energiyasi 0,81 eV ga teng. TN vakansiya-kirishma atom ko'rinishidagi komplekslardir.

Shunday qilib, turli mualliflar ma'lumotlariga ko'ra, TN migratsiya energiyasi miqdori 0,3 — 1 eV oralig'ida yotadi. Termik nuqsonlar kremniyning man qilingan sohasida elektronlar uchun mahalliy energetik sathlar yaratadilar va materialning elektrik va fotoelektrik xossalarini o'zgartiradilar. Svenson fotoo'tkazuvchanlik spektri bo'yicha 78 K da TN lar donor sathlarining ionizatsiya energiyasi-ni aniqladi: $E_0 + 0,4 \text{ eV}$. Ionlanish energiyasining shunga yaqin miqdorlari Xoll effektining temperaturaviy bog'liqligidan olindi.

Kremniyda TN hosil bo'lish energiya miqdori Ge ga nisbatdan odatda ko'proq ($\sim 2,5$ eV), migratsiya energiyasi ($0,3 \div 1$ eV) kamrok ekanligini (~ 2 eV va $1,2 \div 1,3$ eV) ta'kidlash lozim.

Mutloq kattalik bo'yicha mahalliy sathlarning ionlanish energiyasi qiymati, termik nuqsonlar bilan kremniyda yuzaga keluvchi, germaniydagi ionlanish energiyasining mutloq qiymatidan ikki martadan ko'proq. Ko'p hollarda kremniyda TN donor turidagi komplekslar sifatida ko'riladi, germaniyda esa ular akseptor bo'ladi va monovakansiya sifatida ko'riladi (6.10-jadval).

Element	$D_0, \text{sm}^2/\text{s}$	$\Delta H, \text{eV}$	T, °C	Usul
H	$9.4 \cdot 10^{-3}$	0.48	967+1207	5
Li	$4.4 \cdot 10^{-3}$	0.78	450+1000	2
	$2.3 \cdot 10^{-3}$	0.65	360+860	4
	$2.2 \cdot 10^{-3}$	0.70	420+800	1
	$2.5 \cdot 10^{-3}$	0.66	25+125	
			80+1350	4
	$2.65 \cdot 10^{-3}$	0.62	400+500	3
Cu	$4 \cdot 10^{-2}$	1.0	800+1100	1
	$4.7 \cdot 10^{-3}$	0.43	400+700	2
Ag	$2.0 \cdot 10^{-3}$	1.59	1100+1350	1
Au	$1.1 \cdot 10^{-3}$	1.11	800+1200	1
	$2.44 \cdot 10^{-4*}$	0.38	700+1300	1
	$2.75 \cdot 10^{-3**}$	2.0		
Na	$1.65 \cdot 10^{-3}$	0.72	520+820	2
K	$1.1 \cdot 10^{-3}$	0.75	530+790	2
Zn	0.1	1.4	980+1270	4
B	10.5	3.66		2
	3.2	3.5		2
	17.1	3.66		2
	15.8	3.7		2
	10.7	3.64		2
	25	3.51		2
	$6 \cdot 10^{-7}$	1.68	700+1150	1
Al	8	3.45		2
	4.8	3.34	1100+1400	2
	2800	3.77		2
Ga	3.6	3.49		2
	270	4.15		2
	2.1	3.5		2
In	16.5	3.89		2
	19.4	3.86		1

Te	16.5	3.88		2
Sn	32	4.25	1050+1200	1
C	0.33	2.92	1070+1400	1
Si	1800	4.86	1220+1400	1
	9000	5.14	1100+1300	1
Ge	$6.26 \cdot 10^5$	5.28	1150+1350	1
P	10.5	3.66		2
	29	3.88		1
As	0.32	3.55		2
	68.6	4.25		2
Sb	5.6	3.92		2
	12.9	3.95		1
Bi	1030	4.6		2
O	0.21	2.55		2
		3.5		2
S	0.92	2.2	1050+1360	2
Cr	0.01	1.0	900+1250	2
Fe	$6.2 \cdot 10^{-3}$	0.86		1
He	0.11	1.26		2

Takrorlash uchun savol va masalalar

1. Kristallarda atomlarni neytronlar yordamida faolashtirish mexanizmi qanday?

2. Sayoz holatli atomlar diffuziyasini alohida belgilari qanday?

3. Tez faollashuvchi atomlar bilan legirlash mexanizmlarini ayting.

4. Kirishma ionlarining elektronlar oqimi bilan ergashtirish effektini tushuntiring.

6. Kremniyda termik nuqsonlar hosil bo'lish mexanizmlarini ayting.

7. Kremniy monokristalida 300 K temperaturadi $\mu_n=1400 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $\mu_p=500 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ bo'lsa, diffuziya koeffitsientlari aniqlansin. (Javob: $D_n=36,1 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $D_p=12,9 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$.)

7. n -turli germaniy kristalida $\mu_n=3900 \text{ sm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, zaryad tashuvchilarning yashash vaqti 100 mks bo'lsa, 300 K temperaturada elektronlarning diffuziya uzunligi aniqlansin. (Javob: $L_p=1 \text{ mm}$.)

8. 300 K temperaturada solishtirma qarshiligi $2 \Omega\cdot\text{sm}$ bo'lgan n -turli

kremniy namunada noasosiy zaryad tashuvchilarning yashash vaqti 5 mks. Yuzalardan birida kovaklar konsentratsiyasi doimiy (10^{13} sm^{-3}) ushlab turilibdi. Diffuzion tok aniqlansin. (Javob: $j_n=2,6 \text{ mA/sm}^2$.)

9. Agar kremniy namunadagi zaryad tashuvchilarning diffuziya koeffitsienti $5 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, diffuziya uzunliklari 5 mm bo'lsa, ularning o'rtacha yashash vaqti aniqlansin. (Javob: $\tau_n=0,5 \text{ ms}$.)

10. Past temperaturali optik tebranishlarda yarimo'tkazgichlarning temperaturasi ikki marta ortsa, zaryad tashuvchilarning harakatchanligi qanday o'zgaradi? (Javob: $\mu_2/\mu_1=0,7$.)

11. 5 mV kuchlanish berilganda 3 pF sig'imga ega bo'ladigan $p-n$ o'tish hosil qilayotgan kremniydagi donorlar konsentratsiyasi $2 \cdot 10^{15} \text{ sm}^{-3}$, akseptorlar konsentratsiyasi esa $6 \cdot 10^{15} \text{ sm}^{-3}$ bo'lsa, $p-n$ o'tishdagi potentsiallar farqi aniqlansin (Javob: $\varphi_{p-n}=6,01 \text{ mV}$.)

7-BOB. YARIMO‘TKAZGICHLARDA KIRISHMALARNING O‘ZARO TA’SIRLASHUVI

7.1. Kirishmalar o‘zaro ta’sirlashuvning ko‘rinishlari

Fazaviy muvozanatlar termodinamikasidan kristalda eriyotgan kirishmalar konsentratsiyasi kimyoviy potentsiallar muvozanati orqali aniqlanadi. Agar har bir faza bir xildagi ideal nuqsonlardan tashkil topgan bo‘lsa, ulardagi parsial kimyoviy potentsiallar

$$\mu_i = g_i^0 + kT \ln C_i \quad (7.1)$$

ko‘rinishda bo‘ladi, bu yerda C_i — nuqsonlar konsentratsiyasi, g_i^0 — birlik nuqsonning erkin energiyasi. Umumiy kimyoviy potentsial parsial kimyoviy potentsiallar yig‘indisiga teng bo‘ladi.

Kristaldagi kirishma atomlari eruvchanligini tavsiflash uchun kristalning va nuqsonlarning idealligiga e’tibor berish kerak. Bunda kiritilayotgan kirishma konsentratsiyasi nuqsonlar konsentratsiyasi tartibida bo‘lishi kerak. Odatda bu oldindan aniq bo‘lmaydi. Agar qandaydir nuqson katta g , ga ega bo‘lsa, kichik konsentratsiyada ham kuchli ta’sir etishi mumkin. Bu ikki noaniqliklar mumkin bo‘lgan har qanday nuqson kristaldagi eruvchanlikni tahlil qilganda to‘la hisobga olishni ko‘rsatadi.

Shunday qilib, geterogen kristaldagi muvozanat komponentalar kimyoviy potentsial muvozanatlashganda ro‘y beradi. Bu shart atomlar orasidagi o‘zaro ta’sir bo‘lmaganda sodda ko‘rinishda bo‘ladi. Lekin o‘zaro ta’sirning butunlay yo‘q bo‘lishi qaralayotgan sistemaga keskin chegara qo‘yish bo‘ladi.

Kirishmalar ionizatsiyasi muvozanat jarayonlariga va elementlar eruvchanligiga ta’sir ko‘rsatadi. Buni hisobga olish uchun kimyoviy potentsialga elektronning kimyoviy potentsialini qo‘shish kerak bo‘ladi. Bu to‘la va parsial erkin energiyaning o‘zgarishidir.

Kirishmalar o‘zaro ta’siri ikkiga bo‘linadi: tashqi va ichki. Ulardan birinchisi kristalning tashqi muhit bilan o‘zaro ta’sirini ifodalaydi. Ikkinchisi ichki o‘zaro ta’sir bo‘lib, kristalning erkin energiyasini o‘zgartiradi. Bu o‘zaro ta’sirlar quyidagi sinflarga bo‘linadi:

- statik - kristal panjaradagi tarkibiy elementlarning siljishi;
- zaryadli - zaryadning saqlanish qonunini ta’minlovchi, kristalda qo‘shimcha potentsial hosil qilmaydigan o‘zaro ta’sirlar;
- potentsial - kristal potentsial energiyasi oshishi hisobiga erkin energiyaning o‘zgarishiga olib keluvchi turli o‘zaro ta’sirlar yig‘indisi;
- assotsiativ (birikmalar hosil qiluvchi)- assotsiatsiya va birikmalar hosil bo‘lishiga olib keluvchi, ya’ni yangi va kristal panjara bo‘ylab yaxlit harakatlana oladigan o‘zaro ta’sirlar.

7.2. Statik o'zaro ta'sirlar

Statik o'zaro ta'sirlar tarkibiy elementlar va kirishmalarning kristal panjara bo'ylab joylashishi bilan bog'langan. Tarkibiy elementlar yig'indisi, kirishmalar tarkibi va simmetriyasi ularning joylashish usullarini aniqlaydi va Boltsman formulasi bilan aniqlanuvchi konfiguratsion entropiyani belgilaydi:

$$S_{\text{konf}} = k \ln W, \quad (7.2)$$

bu yerda W - makroskopik holatlarni aniqlovchi termodinamik ehtimollik.

Ideal kristalni faqat bir yo'l bilan, ya'ni barcha atomlarni o'z tugunlariga joylashtirib hosil qilish mumkin. Berk sistemaning o'z entropiyasini oshirishga harakat qilishi tartibsizliklarni keltirib chiqarib, nuqsonlar hosil bo'lishiga olib keladi.

Statik o'zaro ta'sirning paydo bo'lishi ikkita ob'ekt bir joyni egallay olmasligidan kelib chiqadi. Shuning uchun ularni aralashtirish kerak. Bunday aralashtirishlar soni entropiyaga o'z ulushini qo'shadi.

Kristalning to'la Gibbs energiyasini

$$G = N \mu (P, T) \quad (7.3)$$

ko'rinishda faqat bir komponentli sistema uchun yozish mumkin. Lekin kristal ko'p fazali va ko'p komponentli bo'ladi.

Agar statik o'zaro ta'sirdan boshqa hamma o'zaro ta'sirlar hisobga olinmasa, hajm birligidagi to'la Gibbs energiyasi

$$G = \sum g_i N_i - S_{\text{konf}} \quad (7.4)$$

ko'rinishda bo'ladi, bu yerda g^i — mos partsial erkin energiyalar, N_i — elementlar konsentratsiyasi.

Bu formulada kimyoviy potentsiallar emas, balki partsial erkin energiyalar ishlatilgan. Chunki atomlar uchun bu kattaliklar bir xil. Vakansiya uchun kimyoviy potentsialning ma'nosi yo'q, chunki vakansiyadan tashkil topgan muhit - bu vakuumdir. Kristal tashqarisida vakansiya bo'lmaydi. Shu bilan bir vaqtda erkin energiya uchun vakansiya ulushi shakl shubhasiz bor. Buni atomlar yoki atom va vakansiya birikmalari uchun ham aytish mumkin.

Birikma faqat kristal chegarasida bo'lishi mumkin va uning erkin energiyasi atomlar kimyoviy potentsiali, tarkibiy elementlar o'zaro ta'sir energiyasi va birikmaning kristal matritsa bilan o'zaro ta'sir energiyasini tashkil etadi. Bu holda kimyoviy potentsial haqida gapirish mumkin emas, chunki buyerda bir komponentli modda yo'q.

Partsial erkin energiya ob'ektlar ichidagi o'zaro ta'sirni, kimyoviy potentsial esa atomlar orasidagi o'zaro ta'sirni hisobga oladi. Bunga atomlar va birikmalar entropiyalarining issiqlik tashkil etuvchilari ham kiradi.

Partsial Gibbs energiyasini quyidagi ko'rinishda tavsiflash mumkin:

$$g_i = h_i - S_{iT} \quad (7.5)$$

bu yerda: h_i — partsial entalpiya, unga ichki energiya va o'zaro ta'sir energiyasi kiradi, S_{iT} — tebranish yoki issiqlik entropiyasi.

Parsial erkin energiyadan tashqari to'la energiyadan N_i bo'yicha hosila konfiguratsion entropiyadan hosiladan tashkil topadi:

$$(\partial G / \partial N_i)_{T,P} = g_i - T(\partial S_{\text{konf}} / \partial N_i)_{T,P} \quad (7.6)$$

Agar hosila faqat bir turdagi atomlar bo'yicha olinmasa, kimyoviy potensial statik o'zgarishlar bilan bog'liq bo'lgan va konfiguratsion entropiyadan olingan hosila orqali ifodalangan qo'shimchani oladi:

$$\mu_i = \mu_i^\circ - T(\partial S / \partial N_i)_{T,P} \quad (7.7)$$

Bu formulani

$$\mu_i = \mu_i^\circ + kT \ln x_i \quad (7.8)$$

ko'rinishda yozish mumkin, bu yerda x_i - i- elementlar bilan band bo'lgan joylar ulushi.

(7.6) formuladagi ikkinchi had konfiguratsion entropiyani hisobga oluvchi siljish entropiyasidan olingan hosila natijasidir. (7.7) ifodadan farqli ravishda unga ko'p komponentalar: siljish entropiyasi, ularning simmetrik va mumkin bo'lgan siljishlarini hisobga oluvchi had kiradi.

Konfiguratsion entropiyaning shakllanishida turli tarkibiy elementlari (simmetriyaga ega bo'lmagan) va murakkab tuzilishga (hususiy simmetriyasi) ega bo'lgan ob'ektlar kiradi. Bu simmetriya kristall o'qlari bo'ylab turlicha yo'nalib, konfiguratsion entropiyaning oshishiga olib keladi.

Bu zarralar o'tkazuvchanlik va valent zonaning bo'sh joylariga va nuqsonlar energetik holatlari bo'yicha joylashishi mumkin. Barcha tarkibiy elementlar va ob'ektlar statistik o'zaro ta'sirda ishtirok etadi.

Panjarada turli nuqsonlarning joylashishini ko'rib chiqamiz.

1. Panjaraning konfiguratsion entropiyasi N ta tugunga N_v ta vakansiyani joylashtirish usullari:

$$A = N^\beta / (N - N_v^\beta)! \quad (7.9)$$

Vakansiyalar aynan bir xil bo'lganligi uchun N_v ta vakansiyani joylashtirish usullari:

$$W = N^\beta / (N - N_v^\beta)! N_v^\beta! \quad (7.10)$$

2. Turli nuqsonli panjara. Har bir tarkibiy element panjarada bir-biriga bog'liq bo'lmagan holda joylashadi. Shu bilan bir qatorda hususiy atomlar soni

$$N_\alpha^\beta = N^\beta - \sum N_\alpha^\beta \quad (7.11)$$

Yuqoridagiga o'xshash

$$W = N^{\beta} / (N - \sum N_{\alpha}^{\beta})! P N_{\alpha}^{\beta}! \quad (7.13)$$

3. Tarkibiy elementlari kristalning kimyoviy holatlari bo'yicha joylashgan panjara. Ular ikki yoki undan ortiq komponentali yarimo'tkazgich panjara bo'lagi yoki panjra bo'lagi va turli tipli tugunlar orasidagi atomlar bo'lishi mumkin.

Bu holda umumiy termodinamik ehtimollik alohida sistemalar bo'yicha joylashgan nuqsonlar ehtimolliklari ko'paytmasiga teng. Bu har bir joylashish bir-biriga bog'liq bo'lmagan holda sodir bo'lishi natijasidir. Termodinamik ehtimollik

$$W = P N^{\beta} / (N - \sum N_{\alpha}^{\beta})! P N_{\alpha}^{\beta}! \quad (7.13)$$

orqali aniqlanadi.

4. Birikmalarning yarimo'tkazgich kristall panjarasi bo'yicha joylashishi. Birikmalarni panjara bo'ylab joylashtirilayotganda ular turli yo'nalishlarda joylashishi mumkinligini hisobga olish kerak. Birikma atomlaridan birini bazis sifatida qabul qilamiz. Bu atom tugunlarda yoki tugunlar orasida bo'lishi mumkin. Lekin bazis atomni har bir holatida birikma turlicha turlicha joylashishi mumkin. Birikmaning bazis atomga nisbatan burilishi yangi siljishni bildiradi, uni termodinamik ehtimollikni aniqlashda hisobga olish kerak.

Faraz qilaylik, birikma bazis atomga nisbatan g_{ν} joylashuv holatiga ega bo'lsin. Bu bazis atomning har bir holati g_k marta ayniganligini bildiradi. U holda bir birikmani hisobga olsak, termodinamik ehtimollik g_k marta, hammasini hisobga olsak, $(g_k)^N$ k marta ortadi

$$W = N^{\beta} g_k^N / (N^{\beta} - N_k)! N_k! \quad (7.14)$$

Birikmaning aynish faktori quyidagicha hisoblanishi mumkin. Ideal panjaraning simmetriya elementlari yig'indisi nuqtaviy guruhni tashkil etadi. Hususiy simmetriyaga ega bo'lgan birikma hosil bo'lishi ideal panjara guruhining rangini pasaytiradi. Yangi panjaraning simmetriyasi eski tugunning kichik guruhi hisoblanadi.

Haqiqatan, real kristalni ideal kristal kabi tasavvur qilish mumkin, lekin simmetriya kamayganligi uchun operatsiya kamroq bo'ladi. Kichik guruhning barcha simmetriya operatsiyalari birikmani o'sha joyda qoldiradi va termodinamik holatlar ayni o'xshash bo'ladi.

Birikma oriyentatsiyasini real panjara qism guruhiga kirmagan operatsiyalar o'zgartiradi. Bu operatsiyalar o'z qism guruhini tashkil etadi, u ham ideal panjaraning qism guruhi bo'ladi. Lagranj teoremasiga asosan birikmaning aynish darajasi real panjara qism guruhi indeksiga teng bo'ladi.

5. Elektron va kovaklarning joylashishi. Bu joylashuv o'tkazuvchanlik va valent zonasining erkin holatlariga va nuqsonlarning elektron holatlariga bo'lish mumkin.

Elektron aynishi yo'q bo'lganda ($n \ll N_c$), erkin elektronlar zonadagi hajm birligidagi effektiv holatlar zichligiga teng bo'lgan aynan sathlar to'plamiga teng bo'ladi.

Bu holatlar energiyasi bir xil bo'lganligi uchun N_c marta aynigan n ta elektronlarning zona ichida joylashish ehtimolligi

$$W = (N_c)^n / n! \quad (7.15)$$

formula orqali aniqlanadi, buyerda $(N_c)^n / N_c$ aynish bilan bog'liq holatlar soni. $n!$ Aynan termodinamik holatlarni inkor qiladi.

Xuddi shunga o'xshash kovaklar uchun

$$W = (N_c)^p / p! \quad (7.16)$$

n_i elektronlarni N nuqsonlar bo'yicha joylashtirishning termodinamik ehtimolligini hisoblash uchun spinli aynishni hisobga olish kerak. Eng soddada holda (sathlar aynishi yo'q bo'lganda) ikki hol bo'lishi mumkin.

1. Elektron boshqa elektron bilan egallagan sathga joylashadi, u o'z spinini moslaydi va qolgan joyni egallaydi. Aynish darajasi birga teng.

2. Elektron bo'sh sathga joylashadi va ikkita mumkin holatdan birini egallaydi. Aynish darajasi ikkiga teng.

Agar sath energetik aynigan bo'lsa, aynish darajasini adohida hisoblash kerak.

Spin bo'yicha aynish hisobga olinganda termodinamik ehtimollik

$$W = N_c^\beta! r_\alpha^n R_\alpha^N n_\alpha^{\beta-n} / (N_c^\beta - n_\alpha^\beta)! n_\alpha^\beta! \quad (7.17)$$

ko'rinishda yoziladi, bu yerda: n - elektron bilan to'ldirilgan holatlarning aynish darajasi, p - erkin holatlar.

Elektronni joylashtirish atomni joylashtirishga bog'liq bo'lmaganligi uchun tonlashgan nuqson holat ehtimolligini hisoblash uchun (7.12) va (7.17) ifodalarni ko'paytirish kerak.

Bundan tashqari, erkin elektron va kovaklarning ruxsat etilgan zonalar bo'yicha joylashuvini hisobga olish kerak. Shunday qilib, ionlashgan atomlar uchun termodinamik ehtimollik

$$W = (N_c)^n / n! (N_c)^p / p! N_c^\beta! (r_\alpha^\beta)^\alpha R_\alpha^N n_\alpha^{\beta-n} / (N_c^\beta - N_\alpha^\beta)! (N_\alpha^\beta - n_\alpha^\beta) n_\alpha^\beta! \quad (7.18)$$

ga teng bo'ladi.

Yuqorida termodinamik ehtimollikni hisoblashning barcha xollari ko'rib chiqildi. Konfiguratsion entropiya Boltsman formulasi (7.2) asosida hisoblanadi.

Termodinamik ehtimollik bilan sistemaning statik o'zaro ta'sirini xarakterlovchi hosilani hisoblaymiz:

$$\partial S_{konf} / \partial N_\alpha^\beta = k \ln N_\alpha^\beta - n_\alpha^\beta R_\alpha^\beta (N_c^\beta - N_\alpha^\beta). \quad (7.19)$$

Ko'rinib turibdiki, nuqsonlar konsentratsiyasi qancha kam bo'lsa, uning o'zaro ta'sir ulushi shuncha kam bo'ladi. Agar maxrajdagi nuqsonlar soni

hisobga olinmasa, hamma elektronlar bilan to'ldirilmagan nuqsonlar bilan band bo'lgan joylar kiradi.

Bundan farqli ravishda (7.8) da atomlar bilan to'ldirilgan joylar kiradi (7.8) da aynish darajasi yo'q. Bu (7.7), (7.8) ga nisbatan statistik o'zaro ta'sirni aniqroq hisobga oladi.

7.3. Zaryadli o'zaro ta'sir

Zaryadli o'zaro ta'sir — bu elektromagnit o'zaro ta'sirning bir ko'rinishi. Tashqi elektromagnit maydon bo'lmaganda yarimo'tkazgichli kristal o'z neytralligini saqlashga harakat qiladi. Shuning uchun barcha zaryadli zarrachalar uchun elektr neytrallik qonuni bajariladi.

Musbat zaryadlar yig'indisi manfiy zaryadlar yig'indisiga teng bo'lganligi uchun

$$\sum_i Q_i = 0. \quad (7.20)$$

Bu qonunga ko'ra yarimo'tkazgichda kovaklarni tutuvchi energetik xolatlar yuzaga kelsa, erkin elektronlar yoki elektronlarni tutuvchi energetik xolat yuzaga kelishi kerak. Bunga asosan

$$n + \sum_i N_{ci} = p + \sum_i N_{di}^+. \quad (7.21)$$

Zaryadli o'zaro ta'sir ikki karrali legirlashda muxim ahamiyatga ega. Qo'shimcha donorlar kiritilishi akseptorlar eruvchanligini oshiradi yoki aksincha. Shuning uchun Gibbs energiyasini yozishda donor va akseptor holatlar farqini hisobga olish kerak.

Kristalga ehtiyotsizlik bilan nuqson kiritish bir jinsli bo'lmagan kuch maydonlarini yuzaga keltiradi. Bu maydonlar tabiati har xil bo'lishi mumkin.

Nuqsonlarning ionlashishi elektromagnit maydonni yuzaga keltiradi. Nuqson paydo bo'lganda panjara cho'ziladi yoki qisiladi, shuning uchun ulardagi tabiiy fluktuatsiyalar bir jinsli bo'lmagan mexanik kuchlanishlarni yuzaga keltiradi. Shuningdek, gravitatsion o'zaro ta'sir ham bor, lekin ularni nuqson hosil bo'lishida hisobga olmaslik mumkin.

Kuch maydoni borligi kristal energiyasini o'zgartiradi, chunki ichki energiya bilan bir qatorda potensial energiya ham yuzaga keladi. Shuning uchun bu o'zaro ta'sir potensial o'zaro ta'sir deyiladi.

Bu holda kristalning to'la energiyasi Gibbs energiyasi va potensial energiya yig'indisiga teng bo'ladi:

$$E = G + E_p. \quad (7.22)$$

Kuch maydoni o'zgarmaydigan kichik hajmda to'la energiyadan to'la differensial olamiz:

$$dE = (\partial E / \partial T)_{P,N} dT + (\partial E / \partial P)_{T,N} dP + \sum_i (\partial E / \partial N_i)_{T,P} dN_i. \quad (7.23)$$

Potensial energiyani temperatura va bosimga bog'liq emas deb hisoblash mumkin, u holda

$$dE = -SdT + VdP + \sum_i (\partial G / \partial N_i)_{T,P} dN_i. \quad (7.24)$$

Bu yerda birinchi had kuch maydoni yo'qligidagi kimyoviy potensial. Ikkinchi had zarraning kuch maydoni bilan o'zaro ta'sir potentsiali

$$\varphi_i = (\partial E_p / \partial N_i)_{T,P}. \quad (7.25)$$

To'la energiya ekstensiv parametr bo'lganligi uchun (7.3) ga o'xshash muosabatni yozish mumkin

$$E = \sum_i N_i \mu_i(P, T, F), \quad (7.26)$$

bu yerda G — kuch maydoni kuchlanganligi. (7.26) da

$$dE = \sum_i (N_i d\mu_i(P, T, F) + \mu_i(P, T, F) dN_i) \quad (7.27)$$

ni olamiz. (7.24) va (7.27) ni taqqoslab,

$$\sum N_i d\mu_i(P, T, F) = -SdT - VdP, \quad (7.28)$$

$$\mu_i(P, T, F) = \mu_i(P, T, 0) + \varphi_i \quad (7.29)$$

larni aniqlaymiz.

Shunday qilib, kuch maydonida kimyoviy potensial zarraning maydon bilan o'zaro ta'sir potentsialiga ortadi.

Lanno, Burguen monografiyasida potensial o'zaro ta'sir kuchi ta'sir qiluvchi deb nomlangan, chunki bu o'zaro ta'sir masofada yuz beradi. Lekin elektrostatik maydon uchun bu masofa uncha katta emas, 0.8 dan 80 gacha. Shuning uchun potensial o'zaro ta'sir deyish to'g'riroq.

Yarimo'tkazgichli kristallarda nuqsonlar hosil bo'lish masalalarida zaryadning saqlanish qonuni aniq bajariladi, shuning uchun kristaldagi elektrostatik maydon nolga teng va kimyoviy potensial ulush bermaydi.

Shunga qaramay elektrostatik maydonlarda (7.29) ning bajarilishiga ko'p misollar keltirish mumkin. Eng avvalo kuchli elektr maydonlarida kirishmaning aktivatsiya energiyasini kamayishini bildiruvchi mashhur Frenkel nuqsonidir. Bu nuqson birinchi galda elektron bilan Kulon potentsiali o'zaro ta'siriga ega bo'lgan markazlar uchun o'rinli. Elektronni tortuvchi Kulon o'zaro ta'siri bilan tashqi elektr maydoni qo'shilishida aktivatsiya energiyasi

$$\Delta E_F = (e^3 / \pi \epsilon_S F)^{1/2} \quad (7.30)$$

ga kamayadi, bu yerda: F — elektr maydon kuchlanganligi, ϵ_s — yarimo'tkazgichning dielektrik singdiruvchanligi.

Kuchli elektr maydonlarida nuqson hosil bo'lishi kam o'rganilgan va elektr maydonining nuqson hosil bo'lish entalpiyasiga ta'siri haqida ma'lumotlar yo'q.

Elektrostatik maydonlar shuningdek, nuqson ionizatsiyasi bilan ham bog'liq. U ionning zaryad holati bilan aniqlanadigan nuqtaviy zaryadga ega. Ionlarning o'zaro ta'sir energiyasi

$$\Delta E = z_1 z_2 e^2 / 4\pi\epsilon_s r \quad (7.31)$$

ga teng, bu yerda: $z_1 z_2$ — o'zaro ta'sirlashuvchi ionlarning zaryad holatlari, r — ular orasidagi masofa.

(7.31) formula taqribiy hisoblanadi, chunki u elektrostatik o'zaro ta'sirdan boshqa ta'sirlarni hisobga olmaydi. Lekin, unga tayanib, o'zaro ta'sir xarakterini sifat jihatdan tahlil qilish mumkin.

Agar nuqsonlar ishorasi har xil bo'lsa, ular tortishadi va o'zaro ta'sir energiyasi manfiy bo'ladi. Shuning uchun Kulon o'zaro ta'siri birikmalar hosil bo'lishining sabablaridan biridir, chunki ularning tortishishi birlashishga olib keladi. Lekin bu yagona sabab emas.

Elektrostatik o'zaro ta'sirda birlashishga olib kelmaydigan ikkita xol bo'lishi mumkin.

1. Bir xil ishorali nuqsonlar, ularning energiyasi musbat.
2. Bir xil ishorali kam haraktchan nuqsonlar, ular birlashish uchun bir-birlariga yaqin kela olishmaydi.

Bu past past temperaturalarda sodir bo'lishi mumkin. Bir tomondan past temperaturalarda diffuziya koeffitsienti kichik bo'ladi, ikkinchi tomondan, elektrostatik o'zaro ta'sir radiusi energiyasi eng katta ehtimolli energiyaga teng bo'ladi. Temperatura pasyishi bilan bu radius ortadi, shuning uchun biz ko'rayotgan xol ehtimolligi katta bo'ladi.

N ta tugundan iborat kristalning Gibbs erkin energiyasini ko'ramiz, unda N konsentratsiyali zaryadlangan kirishmalarning statistik taqsimoti (7.29) ni hisobga olgan holda turg'un juftlar hosil bo'lish shartidan

$$G = \mu_\beta^\beta N_\beta^\beta + (\mu_\alpha^\beta + \varphi_{\alpha\gamma}) N_\alpha^\beta + (\mu_\alpha^\beta + \varphi_{\gamma\alpha}) N_\gamma^\beta - kT \ln W. \quad (7.32)$$

Juftliklar hosil bo'lmaganligi uchun kirishmalar tugunlarga bir-biriga bog'liq bo'lmagan holda joylashishadi. Bundan tashqari, kirishmalar to'la ionlashgan, shuning uchun elektron va kovaklar joylashishini ko'rish shart emas

$$W = N! / (N^\beta - N_\alpha^\beta - N_\gamma^\beta)! N_\alpha^\beta! N_\gamma^\beta! \quad (7.33)$$

Elektrostatik o'zaro ta'sir potentsiali

$$\varphi_{\alpha\gamma} = \varphi_{\gamma\alpha} = z_\alpha z_\gamma e^2 / 4\pi\epsilon_s r_{\alpha\beta} = Q / r_{\alpha\gamma} \quad (7.34)$$

ifoda bilan aniqlanadi, bu yerda $r_{\alpha\gamma}$ nuqsonlar orasidagi o'rtacha masofa, $Q>0$ — itarilish uchun, $Q<0$ tortishish uchun.

Nuqsonlar panjara tugunlarida statistik taqsimlangani uchun ular orasidagi o'rtacha masofani

$$r_{\alpha\gamma} = (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\lambda}^{\beta})^{-1/3} \quad (7.35)$$

ifoda orqali baholash mumkin.

Kristall energiyasi

$$G = \mu_{\beta}^{\beta} N_{\beta}^{\beta} + \mu_{\alpha}^{\beta} N_{\alpha}^{\beta} + Q N_{\alpha}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\alpha}^{\gamma})^{1/3} + \mu_{\lambda}^{\beta} N_{\lambda}^{\beta} + Q N_{\gamma}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta})^{1/3} - kT \ln W \quad (7.36)$$

ko'rinishni oladi. Bu yerdan

$$\partial G / \partial N_{\alpha}^{\beta} = \mu_{\alpha}^{\beta} + 5/3 Q \sqrt[3]{N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}} - kT [\ln(N^{\beta} - N_{\alpha}^{\beta} - N_{\gamma}^{\beta}) - \ln N_{\alpha}^{\beta}] \quad (7.37)$$

kimyoviy potensialga elektrostatik o'zaro ta'sirni hisobga oluvchi qo'shimcha qo'shilganligini ko'rish mumkin. Bu kirishmalar konsentratsiyaga ta'sir qiladi. (7.37) dan

$$N_{\alpha}^{\beta} = N^{\beta} \exp(-\mu_{\alpha}^{\beta} / kT - 5Q/3kT \sqrt[3]{N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}}). \quad (7.38)$$

(7.38) formula soddalashgan algoritm asosida olindi va taqribiy hisoblanadi. Xususan, unda elektrostatik ekranlash bilan bog'liq bo'lgan Debay-Xyukel tuzatmasi hisobga olinmagan. Lekin ekranlash effekti harakatchan zaryad tashuvchilarni talab qiladi. Elektrolitlarda ular bor. Qattiq jismlarda esa kirishmalar harakati ekranlash uchun yetarli emas. Shuning uchun yarimo'tkazgichlarda ekranlash erkin zaryad tashuvchilar harakati bilan bog'liq.

Shunga qaramay (7.38) formula kiritilayotgan kirishmalar o'zaro ta'siri natijasida bir-biriga ta'sir etishini bildiradi. Agar $Q>0$ bo'lsa kirishmalar bir-birini itaradi va ularning eruvchanligi kichi. Bu kuchli legirlangan yagona kirishma uchun o'rinli, chunki konsentratsiya ortishi bilan o'rtacha masofa kamayadi va eruvchanlik pasayadi. Agar $Q<0$ bo'lsa, kirishmalar tortishishadi, o'zaro eruvchanlik ortadi.

Elastik o'zaro ta'sir rolini ko'ramiz. Panjarada nuqson paydo bo'lganda u cho'ziladi yoki siqiladi. Qayta zaryadlanish jarayonlari qo'shimcha reaksiyani yuzaga keltiradi va elektron-fonon o'zaro ta'sir hisobiga panjara qutblanadi.

Shuning uchun deformatsiya bilan bog'liq qo'shimcha energiya yuzaga keladi. Bu energiya juftlashish yoki birikish hisobiga kamayishi mumkin. Shuning uchun deformatsiya birikmalarning ba'zi ko'rinishlarini yuzaga kelishiga sabab bo'ladi. Elastik kuchlanish dislokatsiya hosil bo'lishi hisobiga yo'q bo'lishi mumkin.

Bizni birinchi navbatda nuqson hosil bo'lish jarayonlariga elastik kuchlanishlar qanday ta'sir etishi qiziqtiradi. Shuning uchun yuqoridagi hisob-kitoblarni takrorlab, elastik kuchlar taqsimlanishini qanday baholanishini tahlil qilamiz.

Elastik o'zaro ta'sir masalalari Leybfrid va Broyer monografiyasida batafsil yoritilgan. Unda nuqsonning tashqi elastik defmatsiyalar bilan o'zaro ta'siri va o'zaro deformatsiya hosil qiluvchi ikki nuqson o'rtasidagi o'zaro ta'sir energiyasi hisoblab chiqilgan. Bu energiya r^1 bo'yicha qatorga yoyilsa, asosiy kuch $\sim r^3$ kabi bo'ladi. Shuning uchun o'zaro ta'sir potensialini

$$\varphi_{\alpha\gamma} = \sigma / r^3 = P_{\alpha}^{\alpha} / 4\pi e_{11} r^3 [S_{\rho} \{ P^{\beta} \} - 3(R, P^{\beta} R)] \quad (7.39)$$

ko'rinishda tanlaymiz. U holda erkin energiya

$$G = \mu_{\beta}^{\beta} N_{\beta}^{\beta} + \mu_{\alpha}^{\beta} N_{\alpha}^{\beta} + \mu_{\gamma}^{\beta} N_{\gamma}^{\beta} + \sigma [N_{\alpha}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}) + N_{\gamma}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta})] - kT \ln W. \quad (7.40)$$

Bu yerdan

$$\partial G / \partial N_{\alpha}^{\beta} = \mu_{\alpha}^{\beta} + 2\sigma (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}) - kT [\ln(N_{\alpha}^{\beta} - N_{\alpha}^{\beta} - N_{\gamma}^{\beta}) - \ln N_{\alpha}^{\beta}]. \quad (7.41)$$

Bu yerdagi ikkinchi had nuqsonlar o'rtasidagi elastik o'zaro ta'sirni hisobga oladi. Bu o'zaro ta'sir nuqsonlarning o'zaro eruvchanligiga ta'sir qiladi. (7.41) dan

$$N_{\alpha}^{\beta} = N^{\beta} \exp(-\mu^{\beta} / kT - 2\sigma / kT (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta})). \quad (7.42)$$

Ko'rinib turibdiki, nuqsonlar konsentratsiyasi o'zaro ta'sir potensialiga va elastik kuchlanish tufayli yuzaga keladigan nuqsonlar konsentratsiyasiga bog'liq bo'ladi.

Shunday qilib, tashqi kuch maydonlari va nuqson hosil bo'lishi bilan bog'liq ichki maydonlar kristal energiyasining o'zgarishiga olib keladi. Ximiyaviy potensialga kuchlar o'zaro ta'siri bilan bog'liq qo'shimchalar qo'shiladi. Natijada nuqsonlarkonsentratsiyasi o'zaro ta'sir potensialiga bog'liq ravishda o'zgaradi.

Nuqtaviy nuqsonlar hosil qiluvchi potentsiallar qisqa ta'sir qiluvchidir. Shuning uchun bu effektlar kuchli legirlanganda yuzaga keladi.

Shuni ham aytish kerakki, tashqi maydonlar tortuvchi Kulon markazlari uchun Frenkel effektiga o'xshash effektlarni keltirib chiqarishi mumkin. Ya'ni tashqi maydon nuqson hosil bo'lishi nuqsonlar hosil bo'lish entalpiyasining kamayishiga va ularning konsentratsiyasi oshishiga olib keladi.

Quyidagi 3 ta shartni qanoatlantiruvchi eritmalar ideal deyiladi

1) Komponentalarining partzial ichki eneriyasi eritma konsentratsiyasiga

bog'liq emas. Ichki to'la energiya komponentalar ichki energiyalari yig'indisiga teng.

2) Komponentaning partzial molyar hajmi siljishda o'zgarmay qoladi.

3) Partzial molyar entropiya siljish entropiyasi

$$\Delta S = -k \ln x_i$$

ga ortadi, bu yerda x_i — i -komponenta bilan egallangan joy ulushi.

Birinci shart har doim bajarilavermaydi, chunki turli xil o'zaro ta'sirlar mavjud. Keyingi ikkita shart bajariluvchi eritmalar regulyar eritmalar deyiladi. Noldan farqli ravishda siljish entalpiyasi mavjud.

Ko'p qattiq eritmalar regulyar eritma hisoblanadi, lekin ularni idealdan og'uvchm regulyar eritma deb hisoblash mumkin.

Regulyar eritmaning siljish entalpiyasi odatda kvazikimyoviy yaqinlashishda qidiriladi.

«A» va «B» sortli atomlar aralastirilayotgan bo'lsin. Har bir sort atomlar ideal eritma hosil qiladi. Shuning uchun siljish entalpiyasi faqat yangi A va B qo'shimchalar tomonidan yuzaga kelgan o'zaro ta'sirlar ulush qo'shadi. Ba'zan kimyoviy bog' o'rnatilganligi haqida gapiriladi. Bunda ularning o'zaro ta'sir entalpiyasi H_{AB} ga teng. Siljish entalpiyasi bu bog' hosil qiluvchi qo'shimcha energiyaning bog'lar soniga ko'paytmasiga teng.

Kristal panjaraning koordinatsion sonini Z bilan belgilaymiz. Kristaldagi joylar soni va har bir sort atomlar bilan egallangan joylar ulushini

$$N = N_A + N_B, \quad x_A = N_A/N, \quad x_B = N_B/N. \quad (7.43)$$

ko'rinishda aniqlaymiz. Bu atomlar o'z joylarini egallash ehtimolligini bildiradi. Shuning uchun A atomning o'z joyini egallash ehtimolligi x_A , B atomniki esa x_B bo'ladi.

Ehtimolliklarni ko'paytirish teoremasiga asosan har ikki atomning bir vaqtda o'z joylarini egallash ehtimolligi $x_A \cdot x_B$. Agar atomlar o'zni almastirilsa, ehtimollik o'zgarmaydi, Shunday qilib, qo'shni joylarni turli atomlar bilan egallanish ehtimolligi $2x_A \cdot x_B$ ga teng.

A-B bog'lar soni kristaldagi umumiy bog'lar yig'indisiga (ZN/2) bog' hosil bo'lish ehtimolligiga ko'paytmasiga teng

$$N_{AB} = 2x_A x_B / 2z N_0 = z N x_A x_B. \quad (7.44)$$

U holda A-A, B-B bog'lar soni

$$N_{AA} = z(N_A - N_{AB})/2 \quad (7.45)$$

Kristalning to'la entalpiyasini

$$H = H_{AA} N_{AA} + H_{BB} N_{BB} + H_{AB} N_{AB} = z N_A / 2 H_{AA} + z N_B / 2 H_{BB} + z N x_A x_B [H_{AB} - 1/2(H_{AA} - H_{BB})] \quad (7.46)$$

ko'rinishda yozish mumkin.

Birinci va ikkinchi hadlar aralashuvchi komponentalar entalpiyasini bildiradi. Uchinchi had aralashish entalpiyasi

$$H_{CM} = x_A x_B \Omega. \quad (7.47)$$

Bu yerda o'zaro ta'sir energiyasi

$$\Omega = zN [H_{AB} - 1/2(H_{AA} + H_{BB})]. \quad (7.48)$$

Agar

$$H_{AB} = 1/2(H_{AA} + H_{BB}) \quad (7.49)$$

shart bajarilsa, regulyar eritma ideal eritmaga aylanadi.

O'zaro ta'sir xarakteriga qarab siljish entalpiyasi musbat yoki manfiy bo'lishi mumkin.

Manfiy entalpiya atomlar orasida o'zaro tortishish mavjudligini bildiradi. Buning sababi unchalik ahamiyatga ega emas. Siljish issiqligining musbat qiymati atomlar orasida itarishish mavjudligini bildiradi. Tortishish eritma yaqin tartib hosil bo'lishiga olib kelishi mumkin, buning natijasida siljish entalpiyasi ortadi.

Erkin Gibbs energiyasini differensiallab, ma'lum

$$\mu_B = \mu_B^0 + kT \ln x_B + (1-x_B)2\Omega \quad (7.50)$$

natijani olamiz, bunda

$$(1-x_B)2\Omega/kT = \ln \gamma_B, \quad (7.51)$$

bu yerda: γ_B — aktivatsiya koeffitsienti, x_B — komponentaning faolligi.

$$\alpha_B = \gamma_B x_B. \quad (7.52)$$

Keltirilgan formulalar kristall muvozanatda bo'lgan muxitda komponentalarni tavsiflash uchun ishlatiladi. Bunda suyuq faza bo'lsa, yaqin tartib nazarda tutiladi.

Nuqsonlar hosil bo'lish jarayonlarida regulyar o'zaro ta'sir rolini ko'rib chiqamiz. Qaralayotgan eritmada ikki xil atom borligini yana bir bor ta'kimdlaymiz. Ulardan biri erituvchi, ikkinchisi eruvchi rolini o'ynaydi. Ular orasida o'zaro ta'sir yuzaga keladi. Bu nuqson bilan kristall matritsa orasida o'zaro ta'sir bo'lishini bildiradi. Bundan tashqari regulyar eritmalar uchun formulalar chiqarishda elementlar juda yaqin joylashgan va qisqa o'zaro ta'sir yuz beradi deb hisoblangan. Bu nuqson hosil bo'lishidir. Shuning uchun regulyar o'zaro ta'sir energiyasi nuqson hosil bo'lish entalpiyasiga kirish kerak.

Yana bir narsani hisobga olish kerak. Nuqsonlar bilan egallangan joylar ulushi birdan juda kichik. Shuning uchun (7.50) formuladagi uchinchi hadni hisobga olmaslik mumkin. Bu holda nuqson entalpiyasi birinchi yaqinlashishda regulyar o'zaro ta'sir natijasida doimiy qo'shimchaga ega bo'ladi.

Shunday qilib, qattiq jismdagi nuqsonlarning doimiy o'zaro ta'sirini hisobga olmaslik mumkin. Bu o'zaro ta'sirni tavsiflovchi parametrlar konsentratsiyaga bog'liq emas va nuqson hosil bo'lish termodinamik parametrlari bilan umumlashtiriladi.

7.4. Birikma hosil bo'lishiga olib keluvchi o'zaro ta'sir

Ma'lum sharoitlarda temperatura pasayishi bilan kristallarda birikmalar hosil bo'lishi mumkin. Birikma - bu hususiy fizik hususiyatlarga ega bo'lgan kristall matritsada kvazimolekula ko'rinishidagi turg'un birikmadir. Birikma kristall simmetriyasidan farq qiluvchi o'z simmetriyasiga ega bo'ladi, ular kristall panjarada bir necha ekvivalent joylarni egallashi mumkin.

Fizik nuqtayi nazardan birikmani yuzaga keltiruvchi kuchlar tabiati turlicha bo'lishi mumkin. Hususan, elektromagnit o'zaro ta'sir muhim rol o'ynaydi. Har bir birikma o'z nuqson hosil bo'lish energiyasiga ega bo'ladi.

Birikma hosil bo'lish jarayoni kimyoviy potensial va tarkibiy elementlar cruvchanligiga qanday ta'sir qilishini ko'rib chiqamiz.

Eng sodda birikma, ya'ni kirishma va vakansiya birikmasini ko'ramiz. Soddalik uchun ionizatsiya jarayonlarini hisobga olmaymiz. Bu holda kristalning erkin energiyasi quyidagi ko'rinishda yozilishi mumkin

$$G = \mu_{\beta}^{\beta} N_{\beta}^{\beta} + \mu_{\alpha}^{\beta} N_{\alpha}^{\beta} + g_{\nu}^{\beta} N_{\nu}^{\beta} + g_k^{\beta} N_k - kT \ln W, \quad (7.53)$$

bu yerda

$$W = \frac{1}{N_k!} \frac{N_k^{N_k}}{N!} \{N\beta - (N_{\alpha}^{\beta} - N_k) - (N_{\nu}^{\beta} - N_k)\}! (N_{\alpha}^{\beta} - N_k)! (N_{\nu}^{\beta} - N_k)! N_k! \quad (7.54)$$

(7.54) ni yozishda erkin tarkibiy elementlarni aralastirish kerakligi e'tiborga olingan. Shuning uchun maxrajdagi N_{α}^{β} — erkin kirishmalar, N_{α} — vakansiyalar. N_{α} bo'yicha hosila olib va nolga tenglab, o'xshash birikmalar konsentratsiyalari uchun ma'lum ifodani olamiz:

$$N_k = ((N_{\alpha}^{\beta} - N_k)(N_{\nu}^{\beta} - N_k) / N\beta) \exp(-g_k / kT). \quad (7.55)$$

Birikma hosil bo'lishida qatnashayotgan kirishmalarning kimyoviy potensialini hisoblaymiz

$$(\partial G / \partial N_{\alpha}^{\beta})_N = \mu_{\alpha}^{\beta} - kT[\ln N^{\beta} - \ln(N_{\alpha}^{\beta} - N_k)]. \quad (7.56)$$

Bu yerdan ko'rinish turibdiki, birikma hosil bo'lish jarayonlari nuqsonning kimyoviy potensialiga ta'sir etadi. Bu eng avvalo statistik o'zaro ta'sir hisobiga yuz beradi.

7.5. Qattiq jismdagi nuqsonlar ionlanishi

Nuqsonlarning ionlanishi va boshqa nuqson hosil bo'lish jarayonlari ta'sirlashuvchi massalar qonuni asosida ko'rib chiqilishi mumkin.

Ionlashish reaksiyasini yozamiz:



Mos muvozanat doimiysi

$$K_{fc} = [B^+]/[B] = \exp(\mu^+_{B^+} + \mu_{\nu} - \mu_c / kT). \quad (7.58)$$

Bu yerda: μ_c — Fermi energiyasi bilan aniqlanuvchi elektronning kimyoviy potentsiali, $\mu^+_{B^+}$ — ionlashgan atom kimyoviy potentsiali.

Fermi energiyasining fizik ma'nosiga mos holda

$$n = N_c \exp(-\mu_c / kT). \quad (7.59)$$

Bundan tashqari ionlashgan va ionlashmagan holatlar Fermi sathlari farqi nuqsonning ionizatsiya energiyasiga teng. U holda (7.3) ni hisobga olinsa, (7.58)

$$K_{fc} = [B^+]/[B] = N_c \exp(-\varepsilon_B / kT). \quad (7.60)$$

(7.60) hisoblashlarda ishlatiladi, ammo u juda to'g'ri emas. Bu noaniqliklarni aniqlash uchun qattiq jismlarda kvant o'tishlar nazariyasiga murojat qilamiz.

Elektronning asosiy holatdan uyg'ongan holatga kvant o'tishni elektron-panjara potensial sistemasini tahlil qilmay turib ko'rib chiqish mumkin emas. O'tish potensial energiya o'zgarishi yoki panjara qutblanishi orqali yuz beradi. Bunday sistema Gamiltoniani

$$\hat{H} = \hat{H}_e(r) + \hat{H}_{el}(r, R) + \hat{H}_L(R) \quad (7.61)$$

bu yerda \hat{H} — atomlar maydonida elektronlar gamiltoniani, \hat{H}_L — kristall atomlari erkin tebranishlari gamiltoniani, \hat{H}_{el} — elektron-fonon o'zaro ta'sir operatori, r — elektronlar koordinatalari, R — yadrolar koordinatalari.

Adiyatik yaqinlashishda to'liq funktsiya yadro koordinatalariga kuchsiz bog'langan deb faraz qilinadi. Shuning uchun (7.61) da yadro koordinatalari bo'yicha hosilalar hisobga olinmaydi.

Shuning uchun to'liq funktsiyani elektron va yadro to'liq funktsiyalari ko'paytmasi shaklida tasavvur qilish mumkin:

$$\Psi = F_e(r, R)\varphi_L(R) \quad (7.62)$$

Shredinger tenglamasi ikkiga bo'linadi:

$$-\hbar^2 / 8\pi^2 m \sum \Delta \Psi_{je}(r, R) + V(r, R) \Psi_{je}(r, R) = W(R) \Psi_{je}(r, R), \quad (7.63)$$

$$-\hbar^2 / 8\pi^2 \sum M^{-1}_\alpha \Delta_\alpha \Psi_L(R) + W(R) \Psi_L(R) = E \Psi_L(R). \quad (7.64)$$

Birinchi tenglama qo'zg'almas yadro maydonida elektronlar holatini tavsiflaydi. Ikkinchisi esa o'rtachalashtirilgan elektronlar maydonida yadro harakatini tavsiflaydi. Elektronlar energiyasining hususiy qiymatlari yadrolar potensial energiyasi hisoblanadi va adiyatik potensial deyiladi.

Kichik tebranishlar yaqinlashishi va normal koordinatalarga o'tish

normal tebranish modlari bo'yicha yoyilgan adiabatik potensialni olishga imkon beradi.

Keyingi hisoblashlarda to'la tebranish spektrini hisobga olish mumkin emas, shuning uchun bir koordinatali yaqinlashishdan foydalaniladi. Bu yaqinlashishda sistemada to'la simmetriyali tebranish modasi bilan o'zaro ta'sir bosh rolni o'ynaydi.

Bu yaqinlashish tebranish xarakteriga qatiq shartlar qo'yadi, hususan, lokal tebranishlarning bosh rolini talab qiladi. Nuqson yaqinida lokal va psevdolokal tebranishlar hosil bo'lish shartlari [9, 10] ishlarda muhokama qilingan.

Kristalning ichki molekulyar tebranishlar chastotasi muhim ahamiyatga ega. Agar ichki molekulyar tebranishlar chastotasi kristal matritsaning ruxsat etilgan chastotalar sohasiga tushsa, kristalda ichki molekulyar tebranishlar energiyasi nurlanadi va tebranishlar tez so'nadi.

Nuqsonlarning zaryad almashish jarayonlarida bunday tebranishlar elektron-fonon o'zaro ta'siriga sezilarli ulush qo'shmaydi. Aksincha, molekulyar tebranishlar chastotasi ruxsat etilgan sohaga tushmasa, tebranishlar sekin so'nadi. Bunda faqat nuqsonga yaqin atomlar tebranish jarayonida ishtirok etadi. Bunday tebranish lokal deyiladi, ular o'zaro ta'sirda muhim rol o'ynaydi.

Lekin lokal tebranishlar chastotasi kristalning rezonans chastotasidan tashqarida joylashishi kerak, shuning uchun bunday tebranishlar energiyasi panjaraning optik fononlar energiyasidan katta bo'lishi kerak. Bu shart ichki molekulyar tebranishlar uchundoim ham bajarilavermaydi. Lekin shunday xollar mavjudki, lokal modlar ruxsat etilgan sohaga tushsa ham asosiy panjara bilan kuchsiz bog'langan yoki kristalga xos bo'lgan tebranish simmetriyasi bilan bunday tebranishlar psevdolokal deyiladi va muhim ahamiyatga ega.

Shredinger tenglamasining bir koordinatali yaqinlashishdagi yechimi elektron uyg'ongan xolatga o'tishda potensial energiyasi ortib, minimum koordinatalari o'zgarishini ko'rsatadi. Bu elektron-fonon o'zaro ta'sir natijasida uyg'ongan holatga o'tilganda yadrolar asosiy xolatga nisbatan siljishini tasdiqlaydi. Bunda bir koordinatali modelda potensial energiyai uchun

$$E_g = E_1 + 1/2\hbar\omega_g Q^2, \quad E_e = E_2 + 1/2\hbar_g (Q - Q_0)^2 \quad (7.65)$$

yechimlar olinadi, bu yerda E_1 — asosiy holat, E_2 — uyg'ongan holat potensial energiyalari, $\hbar\omega_g$ — o'zaro ta'sirda qatnashayotgan fononlar energiyasi asosiy va uyg'ongan holatdagi effektiv chastotalar bir-biridan farq qilishini bildiradi, Q — konfiguratsion koordinata qiymati, Q_0 — uyg'ongan holat potensial energiyasining uyg'ongan holati.

(7.65) formulalar garmonik yaqinlashishda yozilgan. Ular kesishuvchi

parabolalar ko'rinishida tasavvur qilinadi va konfiguratsion koordinatalar diagrammasi deyiladi.

Ta'kidlash kerakki, angarmonik tebranishlar hisobga olinganda parabolalardan og'iriladi. Bundan tashqari rezonans o'zaro ta'sir natijasida egri chiziqlar kesishishmaydi.

Elektronning optik uyg'onish jarayonida o'tishida Frank-Kondon printsipi amal qiladi. Bunda zarraning asosiy xolatdan uyg'ongan holatga o'tishida yadrolar siljishga ulgurishmaydi. Shuning uchun fotonni yutib o'tuvchi nuqson optik o'tish diagrammasida vertikal strelka bilan belgilangan. Nurlanish bilan o'tish esa Q_0 nuqtada berilgan.

Yutish va nurlanish bilan o'tishdagi energiyalar

$$h\nu^{\text{yuti}} = E_0 + s\hbar\omega_g; \quad h\nu^{\text{nur}} = E_0 + s\hbar\omega_g \quad (7.66)$$

ko'rinishda bo'ladi, bu yerda ω_g — termolizatsiya jarayonida qancha foton ajralganligini ko'rsatuvchi faktor, E_0 — asosiy va minimal uyg'ongan energiyalar farqi, u elektron o'tish energiyasi deyiladi.

(7.66) formuladan kelib chiquvchi sodda holda uyg'ongan holatga o'tilganda fonon energiyasi o'zgarmaydi. $s\hbar\omega$ — sistema muvozanat holatga o'tishga intilganda ajraladigan energiyani bildiradi.

Optik yutilish va nurlanish energiyalari farqi panjara qutblanish energiyasini bildiradi. U bir necha nomlarga ega: Frank-Kondon siljishi, Stoks yo'qotish va issiqlik ajralishi:

$$h\nu^{\text{pog'l}} - h\nu^{\text{izl}} = \Delta E = 2s\hbar\omega \quad (7.67)$$

ΔE — issiqlik ajralish kattligi.

Uyg'ongan holat energiyasining minimumi s faktor bilan bog'langan. Bu bog'lanishni topish uchun optik o'tish energiyasini s va Q orqali yozamiz:

$$h\nu^{\text{pog'l}} = E_0 + 1/2 \hbar\omega Q_0^2 = E_0 + \hbar\omega \quad (7.68)$$

bu yerda

$$Q_0 = \sqrt{2S}; \quad S = 1/2 Q_0^2. \quad (7.69)$$

Klassik nuqtayi nazardan asosiy holatdan uyg'ongan holatga nurlanishsiz o'tish potensial egri chiziqlarning kesishish nuqtasi (S) dan o'tishi kerak. Fononlarni yutib sistema avval O nuqtadan S nuqtaga, keyin uyg'ongan holatga o'tadi.

Konfiguratsion koordinatalar modeli nuqtayi nazaridan termik emissiya yuz beradi. Bu holda termik aktivlashish energiyasi qiymati elektron o'tish energiyasi orqali ifodalangani, issiqlik ajralishi esa (7.9) dan olinadigan ifoda orqali aniqlanadi. Avval konfiguratsion

koordinatani topamiz:

$$E_g = E_e = E_{xt} + 1/2 \hbar \omega Q_x^2 = E_0 + 1/2 \hbar \omega (Q_x - \sqrt{2S})^2. \quad (7.70)$$

Bu yerdan

$$Q_x = E_0 + \hbar \omega / \sqrt{2S} - Sh\omega, \quad (7.71)$$

Klassik termik o'tish energiyasi

$$E_x = 1/2 \hbar \omega Q_x^2 = (E_0 + Sh\omega)^2 / 4Sh\omega. \quad (7.72)$$

B nuqtadan *O* nuqtaga teskari o'tish ham *s* nuqta orqali yuz berishi kerak. Bu o'tish elektronning markazda ushlanishini bildiradi. Ravishanki, ushlanish ionizatsiya energiyasiga ega

$$E_v = (E_0 - sh\omega)^2 / 4sh\omega \quad (7.73)$$

Klassik nuqtayi nazardan *A* nuqtadan *B* nuqtaga o'tish taqiqlangan, chunki katta massali yadrolarning tunnellanish ehtimolligi juda kichik. Amalda bunday o'tishlar past temperaturalarda yuz beradi. O'tish nuqtasining o'zgarishi ushlarish koeffitsientining temperaturaga bog'liqligiga olib keladi, buni amalda kuzatish mumkin. O'tish energiyasini eng sodda holda, ya'ni elektron faqat bir xil tipli fononlar bilanta'sirlashadi deb olindi. Lekin buning ehtimolligi kam va markazning maxsus modellarini ishlab chiqish kerak. Bundan tashqari (7.71), (7.72) formulalar erishish qiyin bo'lgan temperaturalardagina to'g'ri. Shuning uchun ularni elektron-fonon o'zaro ta'sirni hisoblashda ishlatish maqsadga muvofiq emas.

Haqiqatan, eksperimentlar 400 K dan past temperaturalarda o'tkaziladi. Sig'im spektroskopiyaga asoslangan eksperimentlar xona temperaturasidan pastda o'tkaziladi. Kichik kirishmalar aktivatsiya energiyasini aniqlashning temperatura diapazoni azot qaynash temperaturasi va undan pastdir. Bu xolda panjara kirishma ionizatsiyasida asosan klassik emas, balki *A* dan *B* ga tunnel usuli bilan o'tiladi.

Kuzatish mumkin bo'lgan temperaturalarda nuqson hosil bo'lish jarayonlarining temperatura diapazoni 600 K dan boshlanadi.

Shunday qilib, past temperaturalarda aniqlangan aktivatsiya energiyasining qiymatlari elektron-fonon o'zaro ta'sir muhim ahamiyatga ega bo'lganligi uchun yuqori temperatura nuqson hosil bo'lish jarayonlarida ishlatilmaydi.

Konfiguratsion diagramma elektron, termik, optik yutib va nurlanib o'tish energiyalari farqini ko'rsatadi, uning yordamida Stoks o'tishining sifat talqini va ushlarish koeffitsientlarining aktiv bog'lanishlarini olish mumkin.

Konfiguratsion koordinatalar modeli spektral chiziqlarning kengayishini tushuntirib beradi. Haqiqatan, faqat *O* nuqtada emas, balki ixtiyoriy nuqталarda yutilish bo'lishi mumkin, chunki sistema bir necha fononni

yutishi yoki chiqarishi mumkin. Bunda yutilayotgan yorug'lik energiyasi o'zgaradi va bir nechta foton yutilish ehtimolligi kam bo'lganligi uchun ν nuqtadan boshqa nuqtalardan o'tish intensivligi kam.

Shunday qilib, spektral chiziqlar elektron-fonon o'zaro ta'sir parametrlari haqida maksimumga ega bo'lgan qo'ng'iroqsimon polosaga kengayadi. Bu polosa shaklini o'rganish elektron-fonon o'zaro ta'sir parametrlarini eksperimental qiymatlarini olishga va ularni kelgusida ishlatishga imkon beradi.

Yana bir qayd. Termik emissiya zaryad tashuvchilarni lokal holatdan erkin holatga o'tkazadi, ya'ni bog'langan holatdan elektronlar o'tkazuvchanlik zonasiga, kovaklar valent zonaga o'tadi. Shunga asosan yarimo'tkazgichlarga bag'ishlangan ishlarda asosiy va uyg'ongan holatlar zona potentsiali bilan bog'laniladi. Lekin konfiguratsion koordinatalar modeli ichki markaziy o'tishlar uchun ishlab chiqilgan. Potensial egri chiziqlar — bu elektron asosiy va uyg'ongan holatda bo'lganda chuqur sath hosil qiluvchi nuqson panjara energiyasi bog'langan holatdan uyg'ongan holatga o'tish hisobga olinmaydi. Bu holdagi nurlanishsiz tutib olish ko'p fononli o'tish mexanizmini yoki nuqsondan panjaraga energiya berilish usulini tushuntirib beradi.

Bunday o'tish uchun elektron chuqur sath hosil qiluvchi nuqson yaqinida ushlanishi kerak. Shuning uchun konfiguratsion koordinatalar diagrammasi zona potentsiallarini tasvirlamaydi. Bu holatlar energiyasi o'tkazuvchanlik zonasining shipi bilan mos tushadi.

Nuqson ionizatsiyasi panjarani uyg'ongan holatga o'tkazadi. U qutblanadi. Elektron-tebranish o'tishda qatnashuvchi fonon effektiv chastotasi nuqson ionizatsiyasida va panjaraning uyg'ongan holatga o'tishida o'zgarishi mumkin. Ba'zi hollarda buni eksperimental aniqlash mumkin.

Aytilganlardan nuqson ionizatsiyasi reaksiyasi muvozanat doimiysiga kiruvchi kattaliklarni aniqlash uchun qat'iy nazariya kerak ekanligi kelib chiqadi. Nuqson hosil bo'lish jarayonlari uchun adiabatik yaqinlashish o'rinli emas va boshqa metodlar ishlab chiqilgan.

Takrorlash uchun savollar

1. Kristallardagi kirishma atomlarining o'zaro ichki ta'sirlashuvi turlari va uning oqibatlarini ayting.
2. Partsiyal erkin energiyani ta'riflang.
3. Ideal eritmalar hosil qilish shartlari qanday?
4. Fermi energiyasining fizik ma'nosi nima?
5. Lokal tebranishlar deb nimaga aytiladi?

Test topshiriqlari

1. Diffuziya hodisasi nimani anglatadi?

- A) Modda almashuvini;
- B) Atomlarning o'zaro kirishuvini;
- D) Bir modda atomlarini ikkinchi modda atomlariga kirishivini.
- E) Suqulma atomlarning hosil bo'lishivini.

2. Kristallning oddiy yacheykasi nima?

- A) Kristallning eng kichik bo'lagi;
- B) Kristallni barcha xususiyatlarini saqlab qoluvchi eng kichik bo'lagi;
- D) Kristall atomlari joylashishi tuzilmasi.
- E) Kristalni eng katta bo'lagi.

3. Panjara doimiysi — bu...

- A) Panjara atomlari orasidagi masofa.
- B) Panjaradagi ikki qo'shni atom orasidagi masofa.
- D) Panjaralar orasidagi masofa.
- E) Panjaraning eng boshi bilan eng ohiri orasidagi masofa.

4. Kristallarda nechta singoniya mavjud?

- A) 16.
- B) 7.
- D) 11.
- E) 20.

5. Kristall panjaralari turlari nechta?

- A) 16.
- B) 7.
- D) 11.
- E) 20.

6. Miller indekslari — bu...

- A) Panjara tomonlari tuzilmalari.
- B) Panjara atomlari orasidagi masofalar.
- D) Panjara o'qlarining koordinata o'qlaridagi kesimlarini umumiy maxrajga keltirib, maxrajlarini tashlab yuborilgandagi son qiymatlari.
- E) Panjaradagi ikki qo'shni atom orasidagi masofa.

7. Kristallardagi xususiy nuqsonlar nima?

- A) Siljigan atomlar.
- B) Dislokatsiyalar.
- D) Real kristallardagi ideal kristalldan chetlashtishlar.
- E) Panjara atomlarining siljishi.

8. Nuqtaviy nuqsonlar — bu...

- A) Kislород, uglerod.

- B) Vakansiya, klaster, Kirishma atomlar.
 D) O'lchamlari atom o'lchamlari tartibida bo'lgan barcha nuqsonlar.
 E) Dislokatsiyalar.

9. Nuqsonlarning temperaturaga bog'liqligi qanday?

- A) $N = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{KT}\right)$.
 B) $N = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta E - F}{KT}\right)$.
 D) $N = N_0 \exp(-\Delta E / 2KT)$.
 E) $N = N_0 \exp(\Delta E / 2MT)$.

10. Kristallarda chizig'iy nuqsonlar qaysilar?

- A) Har qanday cho'zinchoq nuqsonlar.
 B) Dislokatsiya, bo'linish chegaralari, yoriqlar.
 D) Kristallni qirralari, fazoviy bo'linish chegaralari.
 E) Vakansiya, klaster, Kirishma atomlar.

11. Diffuziya uchun Fikning I-tenglamasi qaysi?

- A) $j = -D \frac{dN}{dx}$.
 B) $D = q \frac{\mu}{KT}$.
 D) $\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$.
 E) $j = \frac{dN}{dx}$.

12. Fikning II-qonunini ko'rsating.

- A) $j = -D \frac{dN}{dx}$.
 B) $D = q \frac{\mu}{KT}$.
 D) $\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$.
 E) $j = -D \frac{dN}{dx}$.

13. Diffuziya koeffitsientini temperaturaga bog'liqligini ko'rsating.

- A) $D = D_0 \exp(-E / KT)$.

B) $\ln D = \ln D_0 - E / KT$.

D) Ikkalasi ham to'g'ri.

E) $D = D_0(E / KT)$.

14. Diffuziya mexanizmlari — bu...

A) Tugunlararo.

B) Vakansiyalar bo'yicha.

D) Tugunlararo vakansiyalar bo'yicha, dissotsiyasi.

E) Ionlanishi.

15. Atomlarning «sekin» diffuziyalanishiga sabab nima?

A) Atomlarning o'lchamlari katta.

B) Ionlanishi qiyin.

D) O'lchamlari va elektron qobig'i asosiy atomlarnikiga o'xshash.

E) Vakansiyalar.

16. Atomlarning «Tez» diffuziyalanishiga sabab nima?

A) Atomlarning o'lchamlari kichik.

B) Ionlanganda o'lchamlari kichik.

D) Atomlarning o'lchamlari asosiy atomlarinikidan katta farq qiladi.

E) Vakansiyalar.

17. Kompensirlangan yarimo'tkazgich nima?

A) Katta qarshilikli yarimo'tkazgich.

B) Ikki xil Kirishma bilan legirlangan yarimo'tkazgich.

D) Bir-biriga yaqin miqdordagi donor va akseptori Kirishma atomlari bilan legirlangan.

E) Vakansiyalari ko'p bo'lgan yarimo'tkazgich.

18. To'la kompensirlangan yarimo'tkazgichga oid ifodani ko'sating.

A) $K > 1$

B) $K < 1$.

D) $K \approx 1$.

E) $K \gg 1$.

19. Donorli kirishma nima?

A) Elektron beruvchi.

B) Elektron oluvchi.

D) Ikkalasi ham.

E) Katta qarshilikli yarimo'tkazgich.

20. Akseptorli kirishma — bu...

A) Elektron oluvchi.

B) Elektron beruvchi.

D) Ikkalasi ham to'g'ri.

E) Kichik qarshilikli yarimo'tkazgich.

21. Kristallarda komplekslar — bu...

A) V - 0, V - P.

B) I. W.

D) Kirishma atomlar va kristall nuqsonlarning o'zaro ta'sirlashuvi natijasi.

E) V - P, V - P.

22. Ionlarni «ergashtirib ketish» hodisasi sababi nima?

A) Kulon kuchlari.

B) O'zaro ta'sirlashuv.

D) Elektronlar «buluti».

E) Nyuton kuchlari.

23. Diffuziya uchun Eynshteyn tenglamasi qaysi?

A) $\frac{D}{D_0} = e^{-\frac{Q}{KT}}$.

B) $\frac{D}{q} = \frac{\mu}{KT}$.

D) $\frac{dN}{dt} = +D \frac{\partial N^2}{\partial x^2}$.

E) $\frac{D}{D_0} = \frac{Q}{KT}$.

24. Kristall sirtining tuzilishi nima?

A) Uzilgan bog'lanishlar.

B) Atomlar yetishmovchiligi.

D) Yupqa oksid qatlami.

E) Vakansiyalar.

25. Dissotsiativ diffuziya nima?

A) Vakansiyalar bo'yicha.

B) Tugunlararo.

D) Ikkalasi aralash bo'lgan hol.

E) Nuqsonlar bo'yicha.

26. p-n o'tish — bu...

A) Metall — yarimo'tkazgich kontakti.

B) p-n tipli yarimo'tkazgich kontakti.

D) Ikki xil modda kontakti.

E) p-n tipli yarimo'tkazgichlarni bir biriga tekkazilishi.

27. Diffuziyani «harakatlantiruvchi» kuchlari nima?

A) Temperatura.

B) Atomlarining o'zaro ta'sirlashuvi.

- D) Temperatura yoki atomlar konsentratsiyasi gradiyenti.
 E) Elektr tokining kamayishi.
- 28. Nuqsonlarning diffuziyaga ta'siri qanday?**
 A) Tezlatadi.
 B) Sekinlatadi.
 D) Ta'sir qilmaydi.
 E) Juda ham sekinlatadi.
- 29. Komplekslar hosil bo'lishining atomlarga ta'siri qanday?**
 A) Sekinlatadi.
 B) Tezlatadi.
 D) Ta'sir qilmaydi.
 E) Juda ham tezlatadi.
- 30. Diffuziyaning faollashish energiyasi nima?**
 A) Atomlarni harakatlantiruvchi energiya.
 B) Atomlarni ionlanish energiyasi.
 D) Atomlarni diffuziyalanishi uchun zaruriy eng kichik energiya.
 E) Elektronlarning atomlardan uzilib chiqishi.
- 31. Diffuziyaning eksponena oldi koeffitsienti nima?**
 A) Doimiy son.
 B) Diffuziya koeffitsientining eng katta qiymati
 D) $T \rightarrow \infty$ dagi D ning qiymati.
 E) $T \rightarrow 0$ dagi D ning qiymati.
- 32. Yarimo'tkazgichdagi energiya sohalari nima?**
 A) Elektron va kovaklar mavjudlik sohalari.
 B) Elektron va kovaklar energiyalari.
 D) Kristalldagi elektron va kovaklar energetik sathlarining yig'indilari.
 E) Fermi sathi.
- 33. Yarimo'tkazgichning ta'qiqlangan sohasida bo'lishi mumkin bo'lgan energetik sathlar qaysilar?**
 A) Donorli.
 B) Akseptorli.
 D) Donorli, akseptorli.
 E) Vakansiyalar .
- 34. Diffuziya temperaturasida toblangan yarimo'tkazgichning termodinamik holati qanday?**
 A) Muvozanatda.
 B) Nomuvozanatliy.
 D) Ikkala holat ham mavjud.
 E) $T \rightarrow \infty$ dagi D ning qiymati.

35. Toblash usulida olingan yarimo'tkazgichga keyingi termik iloshtir berilganda kompensirlanganlik darajasi qanday?

- A) Ortadi.
- B) Kamayadi.
- D) Ikkala hol ham bo'lishi mumkin.
- E) O'zgarmaydi.

36. Kremniyni 300 K da ta'qiqlangan sohasi kengligi qanday?

- A) 0,7 eV.
- B) 1,12 eV.
- D) 2,2 eV.
- E) 0,5 eV.

37. Germaniyni 300 K da ta'qiqlangan sohasi kengligi qanday?

- A) 0,7 eV.
- B) 1,12 eV.
- D) 2,2 eV.
- E) 0,5 eV.

38. n-Si ga nikel kirishmasi kiritilsa uning ($N_{\alpha} < N_{Ni}$) qarshiligi qanday bo'ladi?

- A) Ortadi.
- B) Kamayadi.
- D) O'zgarmaydi.
- E) Sekin kamayadi.

39. p-Ge ga temir kirishmasi kiritilganda uning ($N_{\alpha} < N_{Fe}$) qarshiligi qanday bo'ladi?

- A) Ortadi.
- B) Kamayadi.
- D) O'zgarmaydi.
- E) Sekin kamayadi.

40. p-Si ga kobalt kirishmasi kiritilsa, uning ($N_{\alpha} < N_{Co}$) qarshiligi qanday bo'ladi?

- A) Ortadi.
- B) Kamayadi.
- D) O'zgarmaydi.
- E) Sekin ortadi.

41. n-Ge ga surma kiritilganda uning ($N_{\alpha} < N_{Sb}$) qarshiligi qanday o'zgaradi?

- A) Ortadi.
- B) Kamayadi.

D) O'zgar olmaydi.

E) Ortishi ham, kamayishi ham mumkin.

42. Metallar qizdirilganda uning elektr qarshiligi qanday o'zgaradi?

A) Ortadi.

B) Kamayadi.

D) O'zgar olmaydi.

E) Ortishi ham, kamayishi ham mumkin.

43. Yarimo'tkazgichlar qizdirilganda uning elektr qarshiligi qanday o'zgaradi?

A) Ortadi.

B) Kamayadi.

D) O'zgar olmaydi.

E) Ortishi ham, kamayishi ham mumkin.

44. Metall, yarimo'tkazgich, dielektrik materiallari ta'qiqlangan sohalari kattaligi nisbatlari qanday?

A) $E_{\delta}^o < E_{\delta} > E_{\delta}^M$.

B) $E_{\delta} < E_{\delta}^M > E_{\delta}^o$.

D) $E_{\delta}^M < E_{\delta} > E_{\delta}^o$.

E) $E_{\delta}^M < E_{\delta}^o > E_{\delta}$.

45. Diffuziya yordamida p-n o'tish hosil qilishda moddaning bir qismida qanday o'zgarish bo'ladi?

A) O'tkazuvchanlik turi o'zgaradi.

B) Qarshiligi o'zgaradi.

D) Ikkala xolat ham to'g'ri.

E) Sig'imi o'zgaradi.

46. Yarimo'tkazgichlarda kirishma atomlarni kiritib:

A) Yupqa qatlamlarning xususiyatlarini boshqariladi.

B) Kristallani strukturasi o'zgartiriladi.

D) Qotishmalar hosil qilinadi.

E) Kirishmalar hosil qilinadi.

47. Diffuziyaning ilmiy ahamiyati — bu...

A) Kristallarda atomlar harakatini o'rganish.

B) Kristalladagi atomlarning o'zaro ta'sirlashuvini o'rganishi.

D) Ikkalasi ham to'g'ri.

E) Kirishmalarni o'rganish.

48. Harakatchanlik — bu...

A) Zarrachalar tezligi.

B) Atomlar bilan to'qnashish tezligi.

D) Tok tashuvchilarni birlik yuzadan o'tish tezligi.

E) Zarrachalar tezlanishi.

49. Ionlarning «effektiv zaryadi» nima?

A) Atomdagi yetishmayotgan musbat yoki manfiy zaryad.

B) Qarama-qarshi zaryadli ionlarning tortishish qobiliyati.

D) Kristallarda tajriba holatida kuzatiladigan zarrachani zaryadi.

E) Kristallarda nazariy o'rganiladigan zaryadi.

50. Atomlarda elektronlarning energetik spektri nimf?

A) Elektronlarning aylanish orbitasi.

B) Elektronlarning o'zaro ta'sirlashuv energiyasi.

D) Elektronlarning yadrodan uzoqligining energetik me'yori.

E) Elektronlarning kinetik energiyasi.

51. Yarimo'tkazgichlarda ta'qiqlangan soha — bu...

A) Elektronlari bo'lmagan soha.

B) Elektronlarning yadroga bog'lanish sohasi.

D) Elektronlarning kovak bilan to'qnashish sohasi

E) Barchasi to'g'ri

52. O'tkazuvchanlik sohasi — bu...

A) Elektr tokini o'tkazuvchi soha.

B) Rekombinatsiya sohasi.

D) Elektronlarni yadro tortishi kuchidan ozod bo'lgan energetik soha.

E) Barchasi to'g'ri

53. Valent sohasi — bu...

A) Erkin elektronlar sohasi.

B) Bog'langan elektronlar sohasi.

D) Atomlarni valent elektronlari sohasi.

E) O'tkazuvchanlik sohasi.

54. Kirishma atomlar energetik sathlari nima?

A) Atomlarning kristalldagi o'rni.

B) Atomlarning kristalldagi ionlanish energiyasi.

D) Brave panjaralari soni.

E) Bog'langan elektronlar sohasi.

55. Kubik panjaralar soni nechta?

A) 1.

B) 3.

D) 7.

E) 4.

56. Brave panjaralar soni nechta?

A) 7.

B) 14.

D) 71.

E) 35.

57. Rombik panjaralar soni nechta?

A) 4.

B) 3.

D) 5.

E) 7.

58. Triklin panjaralar soni nechta?

A) 1.

B) 2.

D) 3.

E) 4.

59. Trigonal panjaralar soni nechta?

A) 2.

B) 1.

D) 5.

E) 7.

60. Tetragonal panjaralar soni nechta?

A) 1.

B) 2.

D) 4.

E) 8.

61. Geksogonal panjaralar soni nechta?

A) 3.

B) 7.

D) 1.

E) 4.

62. Kristallarda bog'lanish turlari soni nechta?

A) 3.

B) 5.

D) 7.

E) 9.

63. Kristallarda bog'lanish energiyasi — bu...

A) Atomlarning o'zaro tortishish energiyasi.

B) Alohida atom potensial energiyasidan shu atomning kristaldagi potensial energiyasi ayirmasi.

D) Atomlarning bir-biridan itarilish energiyasi.

E) Atomlarning bir-biriga nisbatan harakatlanish energiyasi.

64. Vakansiya nima?

A) Atomning kristalldagi bo'sh o'rni.

- B) Elektronning bo'sh o'rni.
- D) Atomlar uchun ajratilgan joy.
- E) Kovakni bo'sh o'rni.

65. Tugun nima?

- A) Kristall panjara qirralarining tasavvurdagi kesishish nuqtasi.
- B) Kristall panjarada atomlar turgan joy.
- D) Kristallda atomlar to'qnashuv joyi.
- E) Barchasim to'g'ri.

66. Tugunlararo bo'shliq nima?

- A) Kristall panjara hajmi.
- B) Zich joylashgan atomlar orasidagi bo'shliq.
- D) Kristall panjara tugunlari orasidagi bo'shliq.
- E) Kristal hajmi

67. Komplekslar nima?

- A) Kristallda atomlarning qo'shimchasi.
- B) Kristallda turli xil atomlar birlashmasi.
- D) Kristallardagi ikki va undan ortiq nuqsonlar va atomlarning faol birikmalari.

- E) Vakansiya va elektron birikmasi.

68. Klasterlar nima?

- A) 2-3 ta atom birikmasi.
- B) Ko'plab atomlar birikmasi.
- D) 4-10 ta atom birikmasi
- E) Yakka atom.

69. Elektr o'tkazuvchanlik — bu...

- A) Moddalarda zaryad ko'chishi.
- B) Tok tashuvchilarning tartibli harakati.
- D) Moddalarda tashqi maydon ta'sirida zaryadlarning tartibli harakati.
- E) Hammasi to'g'ri.

70. Yarimo'tkazgich — bu...

- A) Yarimmetall — yarimdielektrik modda.
- B) Elektr o'tkazuvchanligi tashqi ta'sirlar yordamida boshqarilishi mumkin bo'lgan modda.

- D) Elektr o'tkazuvchanligi o'rta bo'lgan qattiq jism.

- E) Elektr o'tkazuvchanligi o'rta bo'lgan modda.

71. Kremniya atomlarning o'zaro bog'lanish turi qanday?

- A) Metall.
- B) Kovalent.
- D) Ion.
- E) Atomli.

72. Kremniyda kristall panjara doimiysi necha A° ga teng?
A) 5,654.
B) 5,43.
C) 5,56.
D) 5,73.
73. Germaniyda elektronlar dreyf harakatchanligi qancha $sm^2/V \cdot s$.
A) 3900.
B) 1500.
C) 8500.
D) 5400.
74. Xususiy germaniyning elektr o'tkazuvchanligi qancha?
A) $2,1 \cdot 10^{-2}$.
B) $4 \cdot 10^{-5}$.
C) $5 \cdot 10^{-8}$.
D) $8 \cdot 10^{-5}$.
75. Kremniyning kristall panjarasi turi qanday?
A) Yonlari markazlashgan kubik.
B) Asoslari markazlashgan rombik.
C) Trigonal.
D) Geksogonal.
76. Kirishma atomlarning kristallarda eruvchanligi nima?
A) Kirishma atomlarning moddaga kirishi mumkin bo'lgan miqdori.
B) Kirishma atomlarning moddadagi miqdori.
C) Kirishma atomlarning ma'lum bog'lanishlar bilan kristall panjarasida joylashgan miqdori.
D) Kirishma atomlarning moddadagi diifuziyasi.
77. Monoklin panjaralar soni nechta?
A) 1.
B) 2.
C) 4.
D) 6.

Фойдаланилган адабиётлар

1. Н. Акрамов, С. Зайнобидинов, А. Тешабоев. Yarim o'tkazgichlarda fotoelektrik hodisalar. Toshkent, «O'zbekiston», 1994.
2. А. Тешабоев, С. Зайнобидинов, Ш. Эрматов. Қаттиқ жисм физикаси, Т. Молия, 2001.
3. Б. И. Болтакс. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках, Л. Наука, 1972.
4. Б. С. Бокштейн. Диффузия в металлах/ М. Metallurgiya, 1979.
5. В. А. Тележкина, К. Б. Толпиго. Теория электронной структуры радиационных дефектов в полупроводниках/ ФТП, т.16, с.1337, 1981.
6. В. В. Пасинков, В. С. Сорокин. Материал электронной техники М., «Высшая школа», 1987.
7. В. В. Пюинков, Л. К. Чиркин. Полупроводниковые приборы М. «Высшая школа», 1987.
8. В. И. Фистуль. Физика и химия твердого тела (в 2х томах) М., Metallurgiya, 1996.
9. В. И. Фистуль. Введение в физику полупроводников, М. «Высшая школа», 1978.
10. В. С. Вавилов. Действие излучений на полупроводники. Физмат изд, 1963.
11. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М., «Наука», 1984.
12. Г. Б. Абдуллаев, Т. Д. Джафаров. Атомная диффузия в полупроводниковых структурах. М., Атомиздат, 1980.
13. Т. Д. Джафаров. Дефекты и диффузия в эпитаксиальных структурах, Л., Наука, 1978.
14. Г. Джонс. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах. М., «Мир», 1968.
15. Г. Е. Пикус. Основы теории полупроводниковых приборов. М., «Наука», 1966.
16. Д. Манинг. Кинетика диффузии атомов в кристаллах, М., «Мир», 1971.
17. Ж. Бургуен, М. Ланно. Точечные дефекты в полупроводниках. Теория. М.:Мир, 1984, 265 с.
18. З. Хакимов, А. Мухтаров, А. Левин. // ФТП, т.26, с.571, 1994.
19. Н. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. Физика полупроводников. М., «Наука», 1977.
20. К. В. Шалимова. Физика полупроводников. М.:Энергоиздат, 1986.

21. Л. С. Стилбанс. Физика полупроводников, М., 1977.
22. М. С. Юнусов, А. Ш. Махмудов и др. Элементарные процессы и электронная структура дефектов в полупроводниках. Т. «Фан», 1986, 177с.
23. С. Зайнабидинов. Физические основы образования глубоких уровней в кремнии, Ташкент, Фан, 1984.
24. С. Зайнабидинов, Х. С. Далиев. Дефектообразования в кремнии, Ташкент, «Университет», 1993.
25. С. Зайнабидинов, М. Носиров, Ж. Алиева. О коэффициентах диффузии 3d элементов в кремнии, Узб. Физ. Жур., 2003, №1, 69-71.
26. А. Тешабоев, С. Зайнобидинов, Э. Мусаев. Яримўтказгичлар ва яримўтказгичли асбоблар технологияси. (Ўқув қўлланма). — Тошкент. 2005, 392 б.
27. Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела, М. Физматгиз, 1993 г.
28. Ю. И. Уханов. Оптические свойства полупроводников. М., «Наука», 1977.
29. Я. Е. Гегузин. Диффузионная зона, М., «Наука», 1979.
30. V. V. Kveller, M. Kittler. W. Schroter. Phys. Rev. 2001, B63, 11520

Test javoblari:

1-D, 2-B, 3-B, 4-B, 5-A, 6-D, 7-D, 8-E, 9-E, 10-B, 11-A, 12-D, 13-D, 14-D, 15-D, 16-D, 17-D, 18-D, 19-A, 20-A, 21-D, 22-D, 23-B, 24-D, 25-D, 26-D, 27-D, 28-A, 29-A, 30-D, 31-D, 32-A, 33-B, 34-A, 35-D, 36-B, 37-A, 38-A, 39-A, 40-B, 41-B, 42-A, 43-B, 44-A, 45-A, 46-A, 47-D, 48-D, 49-D, 50-D, 51-B, 52-D, 53-D, 54-B, 55-B, 56-B, 57-A, 58-B, 59-A, 60-B, 61-B, 62-D, 63-B, 64-B, 65-A, 66-B, 67-D, 68-D, 69-D, 70-D, 71-B, 72-B, 73-B, 74-B, 75-A, 76-A, 77-D.

MUNDARIJA

Kirish	1
1-bob. YARIMO‘TKAZGICHLAR HAQIDA UMUMIY MA’LUMOTLAR	7
1.1. Yarimo‘tkazgichlar fizikasining rivojlanish tarixidan	7
1.2. Yarimo‘tkazgichlarning asosiy hossalari	7
1.3. Toza yarimo‘tkazgich materiallar olish	11
1.4. Kremniy va uning xossalari	13
Takrorlash uchun savollar	15
2-bob. YARIMO‘TKAZGICH KRISTALLARDAGI TUZILISH NUQSONLARI	16
2.1. Ideal va real kristallar	17
2.2. Kristallarda simmetriya	19
2.3. Miller indeksleri	24
2.4. Real kristallar	25
2.5. Nuqsonlar turlari	28
2.6. Termodinamik muvozanatdagi nuqtaviy nuqsonlar	29
2.7. Radiatsion nuqtaviy nuqsonlar	31
2.8. Stexiometrik nuqsonlar	35
2.9. Yarimo‘tkazgichlarda kirishmalar	38
2.10. Dislokatsiyalar	39
Takrorlash uchun savol va masalalar	43
3-bob. KRISTALLARDA NUQTAVIY NUQSONLAR TERMODINAMIKASI	44
3.1 Asosiy termodinamik kattaliklar	44
3.2 Elementar kristallarda Frenkel nuqsonlari konsentratsiyasiga temperaturaning ta’siri	46
3.3. Elementar kristallarda Shottki nuqsonlari konsentratsiyasining temperaturaga bog‘liqligi	47
3.4 Divakansiyalar va birlashmalar hosil bo‘lishi	48
3.5. Birikmalar hosil bo‘lishi	49
3.6. Binar birlashmalarda termik nuqsonlar	49
Takrorlash uchun savol va masalalar	53
4-bob. YARIMO‘TKAZGICHLARDA DIFFUZION JARAYONLAR KINETIKASI	54

4.1. Diffuziya va reaksiyalarning mutlaq tezligi nazariyasi	54
4.2. Diffuziya uchun Eynshteyn munosabatlari	58
4.3. Suqilma kirishma atomlarining diffuziyasi	60
4.4. O'rinbosar qattiq eritmalarda diffuziya hodisasi	64
4.5. Kirkendoll va Frenkel effektlari	65
4.6. Metallarda va boshqa elementar kristallardagi xususiy atomlar diffuziyasi	68
4.7. Qattiq suqilma eritmalarda diffuziya	71
4.8. Diffuziyaning mikroskopik nazariyasi	72
4.9. Ko'p tarkibli sistemalarda atomlar diffuziyasi termodinamikasi	79
Takrorlash uchun savol va masalalar	81

5-bob. YARIMO'TKAZGICHLARDA DIFFUZIYA

NAZARIYASINING AYRIM MASALALARI

5.1. Yarimo'tkazgichlarda birikmalar hosil bo'lishining kirishma atomlar diffuziyasiga ta'siri	83
5.2. Ichki elektr maydonlarining diffuziyaga ta'siri	88
5.3. Bir tarkibli diffuziya	93
5.4. Ko'p tarkibli diffuziya	96
5.5. Yarimo'tkazgichlarda diffuziyaning vakansiyali mexanizmida Kulon o'zaro ta'sirlashuvi	100
5.6. Yarimo'tkazgichlarda diffuziyaning dissotsiativ mexanizmi	103
Takrorlash uchun savol va masalalar	109

6-bob. KREMNIYDA ATOMLAR DIFFUZIYASI

6.1. Kremniyda donor va akseptor kirishmalar diffuziyasi	111
6.2. IV guruh elementlarining kremniydagi diffuziyasi	115
6.3. Kremniyda litii ionlarining harakatchanligi va diffuziyasi	117
6.4. Ishqoriy elementlar diffuziyasi	118
6.5. Kremniydagi misning diffuziyasi	118
6.6. Kremniyda 3d-elementlarning diffuziyasi	120
6.7. Kremniyda tez diffuziyalanuvchi kirishmalar	122
6.8. Doimiy elektr maydonining oltin va kumush atomlarining kremniydagi diffuziyasiga ta'siri	126
6.9. Kremniyda gazlarning diffuziyasi, eruvchanligi va singishi	130
6.10. Germaniy va kremniyda kirishmalarning diffuziya mexanizmidagi ba'zi farqlar to'g'risida	134
6.11. Kremniyda termik nuqsonlar	136
Takrorlash uchun savol va masalalar	139

7-bob. YARIMO‘TKAZGICHLARDA KIRISHMALARNING O‘ZARO TA’SIRLASHUVI	141
7.1. Kirishmalar o‘zaro ta’sirlashuvning ko‘rinishlari	141
7.2 Statik o‘zaro ta’sirlar	142
7.3. Zaryadli o‘zaro ta’sir	146
7.4 Birikma hosil bo‘lishiga olib keluvchi o‘zaro ta’sir	153
7.5. Qattiq jismdagi nuqsonlar ionlanishi	153
Takrorlash uchun savollar	159
Test topshiriqlari	159
Foydalanilgan adabiyotlar	170

**ZAYNOBIDDINOV SIROJIDDIN
YO'LCHIYEV SHAHRIYOR HUSANOVICH
NAZIROV DILSHOD ERGASHEVICH
NOSIROV MUROD ZOKIROVICH**

YARIMO'TKAZGICHLARDA ATOMLAR DIFFUZIYASI

*O'zbekiston Respublikasi Oliy va o'rta maxsus ta'lim vazirligi
tomonidan 5140200 – «Fizika» ta'lim yo'nalishi talabalari
uchun o'quv qo'llanma sifatida tavsiya etilgan*

Muharrir: *M. Po'latov*

Sahifalovchi: *Z. Ro'ziyev*

O'zbekiston faylasuflari milliy jamiyati nashriyoti,
100029, Toshkent shahri, Matbuotchilar ko'chasi, 32-uy.
Tel.: 236-55-79; faks: 239-88-61.

Нашриёт лицензияси: АИ №110, 15.07.2008.

Босишга рухсат этилди: 24. 08. 2012. «Таумс» гарнитураси. Офсет усулида
чоп этилди. Қоғоз бичими 60x84 1/16. Шартли босма табағи 11,0. Нашр босма
табағи 11,5. Адади 500 нусха. Вуяуртма №24.

«START-TRACK PRINT» МЧЖ босмахонасида чоп этилди.
Манзил: Тошкент шаҳри, 8-март кўчаси, 57-уй.

ISBN 978-9943-391-40-6



9 789943 391406

ЎЗБЕКИСТОН ФАЙЛАСУФЛАРИ МИЛЛИЙ ЖАМИЯТИ НАШРИЙОТИ