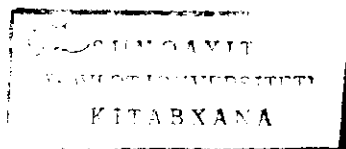


M.M.ZƏRBƏLİYEV

YARIMKEÇİRİCİLƏR FİZİKASI

Ali məktəb tələbələri üçün dərs vəsaiti

Azərbaycan Respublikası Təhsil Nazirinin
06 noyabr 2007-ci il tarixli 1137 saylı əmri
ilə təsdiq olunmuşdur.



BAKİ-2008

28142

622.382(07)
Z51

Elmi redaktor: - dos. Məmmədov E.H.

Rəy verənlər: - Bakı Dövlət Universitetinin «Yarımkəçiricilər fizikası» kafedrasının müdiri, f.-r.e.d., prof. A.H.Kazımsadə;

- Sumqayıt Dövlət Universitetinin «Bərk cisim elektronikas» kafedrasının müdiri, f.-r.e.d., prof. Y.Y.Hüseynov.

M.M.Zərbəliyev. Yarımkəçiricilər fizikası. Ali məktəb tələbələri üçün dərs vəsaiti. – Bakı, «Təhsil» NPM, 2008.

Dərs vəsaiti Dövlət Universitetlərinin «Fizika» ixtisası üzrə bakalavr təhsil pilləsi proqramına uyğun tərtib olunmuşdur.

Dərs vəsaitində elektrik keçiriciliyinin elektron nəzəriyyəsinin əsasları, yarımkəçiricilərin zona nəzəriyyəsinin əsasları, yarımkəçiricilərdə elektron və deşiklərin statistikasını, kinetik hadisələr, yükdaşıyıcıların kristallarda səpilməsi, kontakt hadisələri, optik və fotoelektrik hadisələr, yarımkəçiricilərin əsas parametrlərinin bir çox təyini üsulları şərh edilmişdir.

Vəsait Dövlət Universitetlərinin proqramına uyğun yazılsa da o, həmçinin digər ali məktəb tələbələri, aspirantlar, maqistrantlar və eləcə də yarımkəçiricilər fizikası ilə məşğul olan mütəxəssislər üçün də yararlıdır.

Z – 0033138 -qrifli nəşr
700122

© «Təhsil» NPM, 2008.

MÜNDƏRİCAT

I FƏSİL. ELEKTRİK KEÇİRİCİLİYİNİN ELEKTRON NƏZƏRİYYƏSİNİN ƏSASLARI

§1.1. Maddələrin elektrik keçiriciliyinin qiymətinə və temperatur asılılığına görə təsnifatı. Yarımkeçiricilər.....	8
§1.2. Bərk cisimlərin elektrik keçiriciliyin elektron nəzəriyyəsi. Drude-Lorens modeli.....	12
§1.3. Sərbəst qaçış yolunun və müddətinin paylanma funksiyası.....	17
§1.4. Sadə və mürekkəb kristal qəfəslər.....	21
§1.5. Kristallik sistemlər. Brave qəfəsləri.....	23
§1.6. Kristalda müstəvilərin və istiqamətlərin göstərilməsi. Miller indeksləri.....	25
§1.7. Tərs kristal qəfəs.....	29
§1.8. İnterferensiya şərti və onun tərs qəfəs vektoru ilə əlaqəsi.....	32
§1.9. Yarımkeçiricilərin keçiriciliyi haqqında model təsəvvürlər. Deşiklər haqqında anlayış.....	35
§1.10. Yarımkeçiricilərdə aşqar keçiricilik.....	40

II FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRİN ZONA NƏZƏRİYYƏSİNİN ƏSASLARI

§2.1. Kristal üçün Şredinger tənliyi.....	44
§2.2. Adiabatik yaxınlaşma. Born-Oppenheymer yaxınlaşması.....	46
§2.3. Birelektronlu yaxınlaşma. Hartri-Fok metodu.....	49
§2.4. Kristal qəfəsin periodik sahəsi. Blox dalğası.....	53
§2.5. Kvaziimpuls.....	56
§2.6. Elektronun effektiv kütləsi.....	61
§2.7. Sürətlə kvaziimpuls arasında əlaqə.....	65
§2.8 Təcil operatoru.....	70

§2.9. Kristalda elektronun dalğa vektorunun xassələri. Brilyüen zonaları.....	75
§2.10. Qutuda normalaşma və kvaziimpulsun diskretliyi.....	80
§2.11. Kvazisərbəst (zəif rabitəli) elektron yaxınlaşması.....	83
§2.12. Kvazibağlı (güclü rabitəli) elektron yaxınlaşması.....	96
§2.13. Xarici sahələrin kristalın enerji spektrinə təsiri (effektiv kütlə metodu).....	108
§2.14. Lokallaşmış hallar.....	113
§2.15. Lokal və aşqar səviyyələrin elementar nəzəriyyəsi.....	119
§2.16. Səth halları. Tamm səviyyələri.....	126
§2.17. Pauli prinsipi. Metal, yarımkəçirici və dielektrik anlayışları.....	128
§2.18. Bəzi yarımkəçiricilərin zona quruluşu.....	133
§2.19. Kvazi-zərrəciklər haqqında anlayış.....	140

III FƏSİL. YARIMKƏÇİRİCİLƏRDƏ ELEKTRON VƏ DEŞİKLƏRİN STATİSTİKASI

§3.1. Elektronların hallara görə paylanma funksiyası. Fiziki kəmiyyətlərin orta qiyməti.....	148
§3.2. Hal sıxlığı. Kvant hallarının sayı.....	157
§3.3. Elektron və deşiklərin konsentrasiyası.....	161
§3.4. Elektroneytrallıq tənliyi. Fermi səviyyəsinin temperaturdan asılılığı.....	168
§3.5. Məxsusi yarımkəçirici. Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı.....	170
§3.6. Bir növ aşqarı olan yarımkəçirici.....	172
§3.7. Donor və akseptor tipli iki müxtəlif aşqarı olan yarımkəçirici.....	176

IV FƏSİL. YARIMKƏÇİRİCİLƏRDƏ KİNETİK HADİSƏLƏR

§4.1. Bolsmanın kinetik tənliyi.....	180
§4.2. Relaksasiya müddəti.....	187
§4.3. Elektrik cərəyanının və enerji selinin sıxlığı.....	193

§4.4. Sadə zona quruluşlu yarımkəçiricinin elektrik keçiriciliyi.....	197
§4.5. Yarımkəçiricilərdə istilikkeçirmə. İstilikkeçirmənin müxtəlif mexanizmləri.....	198
§4.6. Qalvanomaqnit effektlər.....	208
§4.7. Termomaqnit effektlər.....	220
§4.8. Termoelektrik effektlər.....	226
§4.9. Tenzorezistiv effekt. Tenzohəssaslıq.....	231
§4.10. Tenzorezistiv effekt. Pyezomüqavimət əmsalları.....	237
§4.11. Qüvvətli elektrik sahələrində yarımkəçiricilərdə daşınma hadisələri. Om qanunundan kənara çıxma.....	244
§4.12. Relaksasiya müddətinin elektrik sahəsindən asılı olması. Qızmar yükdaşıyıcılar.....	246
§4.13. Kəskin qeyri-tarazlıq halının paylanma funksiyası.....	249
§4.14. Qızmar yükdaşıyıcıların temperaturu.....	251
§4.15. Qann effekti.....	258
§4.16. Termoelektron ionlaşma hadisəsi.....	261
§4.17. Zərbə ilə və elektrostatik ionlaşma.....	262
§4.18. Ziner effekti.....	263
§4.19. Volt-ampər xarakteristikası və neqatron effektlər.....	264

V FƏSİL. YÜKDAŞIYICILARIN KRİSTALLARDA SƏPİLMƏSİ

§5.1. Səpilmənin effektiv kəsiyi.....	271
§5.2. Relaksasiya müddətinin keçid ehtimalı və effektiv kəsiklə əlaqəsi.....	281
§5.3. Kvant keçidləri haqda bəzi məlumat. Kinetik tənliyin tətbiq olunma həddüdü.....	284
§5.4. İonlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə.....	288
§5.5. Neytral aşqar atomlarından səpilmə.....	297
§5.6. Dislokasiyalardan səpilmə.....	299
§5.7. Kristalın istilik rəqslərindən (akustik fononlardan) səpilmə.....	300
§5.8. Optik fononlardan səpilmə.....	307

§5.9. Bir neçə səpilmə mexanizminin eyni zamanda mövcud olduğu hal (ümumi hal).....	310
§5.10. Yürüklüyün temperaturdan asılılığı.....	311
§5.11. Kristal qəfəsdə atomların rəqsi.....	315
§5.12. Normal koordinatlar. Kristal qəfəsin Hamilton funksiyası.....	330
§5.13. Qəfəsin rəqslərinin kvantlanması. Fonon qazı.....	333

VI FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ KONTAKT HADİSƏLƏRİ

§6.1. Xarici elektrik sahəsində enerji zonalarının meyli.....	342
§6.2. Çıxış işi. Kontakt potensiallar fərqi.....	346
§6.3. Metal-yarımkerici kontaktı. Kontaktın düzləndirmə xassələri.....	350
§6.4. Yarımkeçiricilərdə elektron-deşik keçidi.....	355
§6.5. $p - n$ keçidin volt-ampere xarakteristikası.....	358

VII FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ OPTİK VƏ FOTOELEKTRİK HADİSƏLƏR

§7.1. Optik əmsallar və onların kristalın dielektrik nüfuzluğu ilə əlaqəsi.....	363
§7.2. Kristallarda işığın udulmasının əsas mexanizmlərinin icmalı.....	368
§7.3. Zonalararası keçidlər üçün udulma əmsalı. Ossilyator qüvvəsi. Gətirilmiş hallar sıxlığı. Van-Hovun xüsusi nöqtələri.....	372
§7.4. Yarımkeçiricilərdə məxsusi udulma sərhəddinin forması. Məxsusi udulma sərhəddinə görə qadağan zonanın eninin təyini.....	376
§7.5. Eksiton udulması. Məxsusi udulma sərhəddində elektron-deşik qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınması.....	382
§7.6. Aşqarların iştirakı ilə optik udulma. Aşqar udulması və aşqarlararası udulma.....	385
§7.7. Sərbəst yükdaşıyıcılarla udulma.....	389
§7.8. Cırılmış yarımkeçiricilərin əks olma spektrində plazma rezonansı.....	395

§7.9. Fonon udulması və aşqar atomlarının lokal rəqsləri vasitəsilə udulma.....	396
§7.10. Yarımkəçiricilərin optik xassələrinin tədqiqinin diferensial üsulları.....	401
§7.11. Yarımkəçiricilərdə rekombinasiya şüalanması.....	404
§7.12. Spontan və məcburi şüalanma. Yarımkəçirici lazerlər.....	411
§7.13 Fotokeçiricilik.....	414
§7.14 Yarımkəçiricilərdə fotovoltaiq hadisələr.....	420

VIII FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRİN ƏSAS PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ ÜSULLARI

§8.1. Yarımkəçiricilərin əsas parametrlərinin təsnifatı.....	426
§8.2. Yarımkəçiricilərin xüsusi elektrik keçiriciliyinin ölçülməsi...	429
§8.3. Düzgün həndəsi formalı yarımkəçirici nümunələrin elektrofiziki parametrlərinin ölçülməsi.....	433
§8.4. Yarımkəçiricilərdə qüvvətli sahə effektlərinin tədqiqi üsulu.....	436
§8.5. Bərk cisimlərin istidən genişlənmə və izotermik sıxılma əmsallarını ölçmə üsulu.....	440
§8.6. Qeyri - esas yükdaşıyıcıların diffuziya uzunluğunun və yaşama müddətinin təyini üsulları.....	449
İstifadə olunmuş ədəbiyyat.....	455

I FƏSİL

ELEKTRİK KEÇİRİCİLİYİNİN ELEKTRON NƏZƏRİYYƏSİNİN ƏSASLARI

§1.1. Maddələrin elektrik keçiriciliyinin qiymətinə və temperatur asılılığına görə təsnifatı. Yarımkeçiricilər.

Real maddələr σ elektrik keçiriciliyinin müxtəlif qiymətləri ilə xarakterizə olunurlar. Bir sıra maddələrin elektrik keçiriciliyi cədvəl 1-də verilmişdir. Bu cədvəldən görüldüyü kimi, qızıl, gümüş, mis kimi metalların xüsusi elektrik keçiricilikləri $10^7 \text{ Sm} \cdot \text{m}^{-1}$ tərtibində olduğu halda, ebonit və kəhrəba üçün bu kəmiyyət $10^{-14} \text{ Sm} \cdot \text{m}^{-1}$ tərtibindədir. Keçiricilikləri $\sigma \approx (10^7 \div 10^6) \text{ Sm} \cdot \text{m}^{-1}$ tərtibində olan maddələri keçiricilər və ya metallar, $\sigma \approx (10^{-8} - 10^{-17}) \text{ Sm} \cdot \text{m}^{-1}$ tərtibində olanları isə izolyator və ya dielektriklər adlandırmaq qəbul olunmuşdur.

Cədvəl

№	Maddə	σ , Simens/m	№	Maddə	σ , Simens/m
1	Mis (tablanmış)	$6,30 \cdot 10^7$	7	Almaz	10^{-10}
2	Gümüş	$6,03 \cdot 10^7$	8	Slyuda	$1,1 \cdot 10^{-11}$
3	Mis (dartılmış)	$5,62 \cdot 10^7$	9	Pireks	$1 \cdot 10^{-12}$
4	Qızıl	$4,13 \cdot 10^7$	10	Kvars	$5 \cdot 10^{-13}$
5	Alüminium	$3,12 \cdot 10^7$	11	Ebonit	$5 \cdot 10^{-14}$
6	Nixrom	$9 \cdot 10^5$	12	Parafinləşdirilmiş mum	$3,3 \cdot 10^{-17}$

Keçiriciliklərinin qiyməti metallarla dielektriklər arasındakı intervala düşən maddələr isə yarımkeçiricilər adlanır. Yarımkeçiricilər üçün xüsusi keçiricilik $\sigma \approx (10^{-8} + 10^6) \text{ Sm} \cdot \text{m}^{-1}$ intervalına düşür. Buradan görünür ki, yarımkeçiricilərin elektrik keçiriciliklərinin qiyməti 10^{14} tərtib qədər fərqli ola bilər. Belə təyin yarımkeçiricilərin spesifik xüsusiyyətləri barədə heç bir məlumat vermir. Amma metal və yarımkeçirici maddələrin temperatur asılılıqlarını müqayisə etsək, onlar arasındakı fərq çox aydın nəzərə çarpar. Metallarda temperatur yüksəldikcə, elektrik müqaviməti də artır:

$$R(t) = R_0 (1 + \alpha t), \quad (1.1.1)$$

burada R_0 $-t=0^\circ\text{S}$ -də, R_t isə $t^\circ\text{S}$ -də müqavimətlər, α -müqavimətin termik əmsalı olub, təxminən $\frac{1}{273\text{K}}$ -ə bərabərdir. Metallar üçün

$$\alpha = \frac{dR}{dt} = \frac{dR}{dT} > 0$$

şerti ödənilir.

Yarımkəçiricilər üçün elektrik müqaviməti temperaturun artması ilə kəskin azalır. Müəyyən temperatur intervallarında yarımkəçiricilərdə müqavimətlə mütəq temperatur arasında aşağıdakı kimi empirik asılılıq müşahidə olunur:

$$R(T) = R_0 e^{B/T}, \quad [\sigma] = \text{Sm} \cdot \text{m}^{-1} \quad (1.1.2)$$

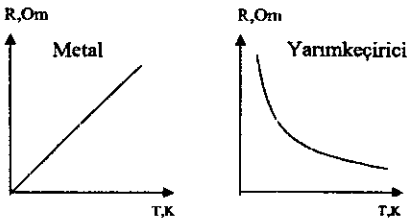
burada R_0 və B kəmiyyətləri hər hansı yarımkəçiricilərdə baxılan temperatur intervallarında müəyyən sabitlərdir. Xüsusi keçiricilik üçün bu asılılıq

$$\sigma = \sigma_0 e^{-B_1/T} \quad (1.1.3)$$

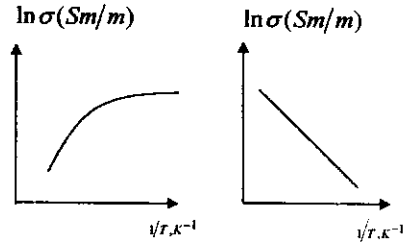
kimidir. Eksponentin üstündəki kəsrin sürət və məxrəcini k - Bolsman sabitinə vursaq və $kB = \Delta E_a$ işarələməsini etsək,

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E_a}{kT}} \quad (1.1.4)$$

alırıq. Verilmiş yarımkəçirici üçün xarakterik ΔE_a kəmiyyəti aktivləşmə enerjisi adlanır. Müxtəlif temperatur intervalları üçün bu kəmiyyət müxtəlifdir. Şəkil 1.1-də metal və yarımkəçiricilər üçün müqavimətin temperatur asılılıqları verilmişdir. Şəkil 1.2-də isə $\ln \sigma$ - nın temperaturunun tərs qiymətindən asılılığı təsvir olunmuşdur.



Şəkil 1.1 Metal və yarımkəçiricinin müqavimətinin temperaturdan asılılığı.



Şəkil 1.2 Metal və yarımkəçiricilərdə $\ln \sigma$ - nın temperaturun tərs qiymətindən asılılığı.

ΔE - aktivləşmə enerjisinin mövcudluğu göstərir ki, keçiriciliyi artırmaq üçün yarımkəçiriciyə müəyyən enerji verilməlidir. Bu enerji müxtəlif yollarla, məsələn, istilik enerjisi verməklə, onu işıqlandırmaqla, radioaktiv şüalandırmaqla, elektrik və maqnit sahələrinin təsiri ilə, yüksək təzyiqlə yaratmaqla və s. üsullarla həyata keçirilə bilər. Bütün bunlar göstərir ki, yarımkəçiricilər dedikdə elektrik keçiriciliyi temperatur, təzyiqlə, xarici sahələr, işıqlandırma, radioaktiv şüalandırma kimi

xarici amillərin təsiri ilə elektrik keçiriciliyi güclü dəyişən maddələr başa düşülür.

$T \rightarrow 0$ şərtində və xaricdən əlavə enerji verilmədikdə yarımqeçiricilərin (cırılmış) keçiricilikləri sıfıra yaxınlaşdığından, belə də demək olar ki, yarımqeçiricilər-yalnız həyacanlaşmış halda keçiriciliyə malik olan maddələrdir. Belə təyin etmədə yarımqeçiricilərlə dielektriklər arasında prinsip etibarlı ilə ehtə bir fərq olmadığı halda, onların metallardan olan fərqi çox ciddi nəzərə çarpır.

Müxtəlif amillərin yarımqeçiricilərin keçiriciliyinə təsiri maddələrin xassələri və quruluş xüsusiyyətlərindən asılı olaraq özünü müxtəlif şəkildə biruzə verir. Eyni xarici təsirlər altında eyni yarımqeçirici maddə monokristalların təmizliyindən, mükəmməliyindən, ondakı defektlərin, müxtəlif aşqar atomlarının konsentrasiyasından və s. asılı olaraq tamamilə müxtəlif keçiriciliyə malik olur.

İki növ yarımqeçirici maddələr mövcuddur: ion və elektron tipli. İon tip yarımqeçiricilərdə keçiricilik ionlarla baş verir və buna görə də ion tip yarımqeçiricidən cərəyan keçməsi prosesi tərkib və struktur dəyişmələri ilə müşayət olunur. Ona görə də bu tip yarımqeçiricilərdən cihazqayırma istifadə edilmir, belə ki, onlar cərəyan axma prosesində dağılmaya (aşınmaya) məruz qalırlar.

Oruplar Dövrələr	II	III	IV	V	VI	VII	
II	Be	B	C	N	O		
III		Al	Si	P	S	Cl	
IV		Ga	Ge	As	Se	Br	
V		In	Sn	Sb	Te	J	Xe
VI			Pb	Bi	Po	At	

Şəkil 1.3 Dövrü cədvəldə sadə yarımqeçirici maddələrin mövqeyi

Elektron tip yarımqeçiricilərdə isə yük daşıyıcılar elektronlardır və bu səbəbdən onlardan elektrik cərəyanı keçərkən maddə daşınması prosesi baş vermir, ona görə də elektron tip yarımqeçiricilərdən hazırlanan cihazların xarakteristikaları uzun müddət dəyişməz qalır.

Müasir dövrdə bəsit yarımqeçiricilərlə yanaşı olduqca müxtəlif tərkibli mürəkkəb yarımqeçirici materiallar da işlənilib hazırlanmışdır və bu çeşid get-gedə daha da zənginləşir. Bəsit yarımqeçirici maddələrə 12 element aiddir: B-bor, C-karbon, Si-silisiyum, P-fosfor, S-kükürd, Ge-germanium, As-arsen, Se-selen, Sn-boz qalay (stannum), Sb-stibium, Te-tellur və J-yod. Şəkil 1.3-də dövrü sistemdə sadə yarımqeçirici element-

lərin mövqeyi verilir. Atomar yarımqeçiricilərdən ən geniş tətbiq olunanları germanium və silisiumdur ki, hədsiz sayda çoxlu yarımqeçirici diod, tranzistor, tiristor və s.- kimi cihazlar məhz onlar əsasında hazırlanırlar.

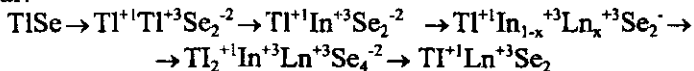
Çoxlu sayda binar, üçqat, dördqat və s. kimi mürəkkəb tərkiblər də yarımqeçirici xassələrə malikdirlər. Binar tərkiblərin ümumi kimyəvi düsturu $A^x B^{8-x}$ kimidir, burada A-X qrupunun, B isə (8-X) qrupunun elementidir. Məsələn, $A^{IV} B^{IV}$ tip binar yarımqeçiricilərə AgCl, CuBr, KBr, LiF və s. kimi maddələr aiddir, bunlar üçün kifayət qədər geniş tətbiq sahələri tapılmamışdır.

$A^{IV} B^{VI}$ tip birləşmələrə sulfidlər, selenidlər, telluridlər, ikinci qrup metalların oksidləri aiddirlər. Onlar arasında ən geniş tətbiq olunanları CdS, CdSe, CdTe, ZnS, ZnO, ZnSe, HgTe, HgSe və bir sıra başqalarıdır.

$A^{III} B^{V}$ tip geniş tətbiq olunan yarımqeçirici maddələrə III qrupun ikinci alt qrup elementləri olan alüminium, qallium, indium və borun antimonid, fosfid, arsenid və nitridləri aiddir.

$A^{IV} B^{IV}$ tiplərə SiC, SiGe kimi birləşmələr aiddir. $A^x B_1^{8-x} B_2^{8-x}$, $A_1^x A_2^x B^{8-x}$, $A_1^x A_2^x B_1^{8-x} B_2^{8-x}$ kimi tərkiblərə malik yarımqeçiricilər də geniş tətbiqat obyektləridir. GaAsP, InGaSb, ZnCdSeTe kimi mürəkkəb tərkiblər bu tip yarımqeçiricilərdəndir.

Son zamanlar respublikamızda $A^{III} B^{VI}$ bu tip yarımqeçiricilərin və onların mürəkkəb analoqlarının alınması, fundamental xassələrinin tətbiqi və tətbiq sahələrinin müəyyən edilməsinə dair böyük işlər görülməkdədir. TlSe, TlTe, InS, InSe, InTe, GaS, GaSe, və GaTe məhz bu tip yarımqeçiricilərə aiddir. Bu birləşmələrdə Tl elementi dəyişkən valentlilik göstərərək özünü bir və üç valentlili kimi aparır. Ona görə də, məsələn, TlSe-nin kimyəvi düsturunu $TlSe \rightarrow Tl_2Se_2 \rightarrow Tl^{+1} Tl^{+3} Se_2^{-2}$ kimi yazmaq daha məqsədə uyğundur. Bu tip birləşmələrdə bir valentli metal atomları əsasən kristalloqrafik fəza quruluşunu müəyyən edir. Yarımqeçirici xassələrin formalaşmasında əsas rolunu üç valentli metal atomları oynayır. Bu birləşmələr əsasında $A^{III} B^{III} X_2^{VI}$ tipli üçqat halkogenidlər: məsələn, $TlInS_2$, $TlInSe_2$, $TlInTe_2$, və s. kimi birləşmələr alınmış, onların fiziki, kimyəvi və s. xassələri geniş tətbiq olunmuşdur. Bu birləşmələr əsasında, üçvalentli indium atomlarını qismən və ya bütövlükdə nadir torpaq elementləri-lantanoidlərlə əvəz edərək aşağıdakı sxem üzrə nadir torpaq elementli üçqat və dördqat yarımqeçirici birləşmələr və bərk məhlullar sırası almaq mümkün olmuşdur:



Sadələnən qeyri-üzvi yarımqeçiricilərlə yanaşı, bir sıra üzvi maddələr də vardır ki, onlar da yarımqeçirici xassələrə malikdirlər.

Yarımkəçirici cihazlar lampalı cihazlardan hər şeydən öncə, müqayisə olunmayacaq dərəcədə kiçik ölçülərə və böyük faydalı iş əmsalına, mexaniki möhkəmliyə, etibarlılığa və s. kimi üstün xüsusiyyətlərə malik olmaqla fərqlənirlər. Yarımkəçirici diodlar mikroamperlərdən minlərlə ampərə, aşağı tezliklərdə, ifrat yüksək tezliklərə, millivoltlardan yüzlərlə volta qədər diapazonda düzləndirici kimi tətbiq oluna bilir. Yarımkəçirici tranzistorlar və digər cihazlar olduqca müxtəlif təyinətli gücləndiricilərdə, generatorlarda geniş tezlik diapazonunda istifadə edilir. Yarımkəçirici cihazlar işıq siqnalları, radioaktiv şüaların qeydi, şüalanma və istilik enerjilərini elektrik və əksinə çevirmə proseslərində, böyük faydalı iş əmsalına malik enerji şüalandırıcıları və qəbuledicilərində, ümumiyyətlə, radioelektronikanın bütün sahələrində geniş tətbiq olunur. Müasir kompüterlər, avtomat idarəetmə sistemlərinin əsasını məhz yarımkəçirici cihazlar təşkil edir.

Hər bir cihazın əsasında müəyyən fiziki proses və hadisə durur ki, bunun mahiyyətini bilmədən, ondan düzgün, lazımı səviyyədə istifadə etmək, müxtəlif xassəli, çeşidli yeni qurğular hazırlamaq mümkün deyil, ona görə də hər bir yarımkəçirici materialın fundamental yarımkəçirici xassələr toplusunun tədqiqi onun tətbiq perspektivlərini müəyyənləməkdə müstəsna rol oynayır. Bu məqsədlə yarımkəçiricilərin keçiriciliyi haqqındakı bəzi model təsəvvürlərlə tanış olaq.

§ 1.2. Bərk cisimlərin elektrik keçiriciliyin elektron nəzəriyyəsi. Drude-Lorens modeli

Metal və yarımkəçiricilərin elektrik keçiriciliyi haqqındakı müasir təsəvvürlər əsasən 1900-cü ildə Drude tərəfindən qoyulmuş və sonralar onun Lorenslə birlikdəki işlərində öz inkişafını tapmışdır. Zommerfeld bu nəzəriyyəyə kvant statistikasını elementləri daxil etmişdir. Elektrik keçiriciliyinin sonrakı inkişafı bərk cismin kvantomexaniki nəzəriyyəsinə əsaslanır. Bununla belə bir çox münasibətlərdə Drude və Lorens yanaşması öz əhəmiyyətini indi də saxlamaqdadır, bu baxımdan klassik elektron nəzəriyyəsinin əsaslarını ümumi şəkildə nəzərdən keçirək.

Yarımkəçiricilər fizikasının bir çox anlayışları metalların elektron nəzəriyyəsinə əsaslanır. Məhz bu nəzəriyyə əsasında elektron keçiriciliyi, yükdaşıyıcıların yüklüklüyü və s. kimi kəmiyyətlərin rolları müvafiq qaydada yarımkəçiricilər üçün də müəyyənləşir.

Metalların klassik elektron nəzəriyyəsində metallarda sərbəst elektron qazına kristal qəfəsin ionları ilə istilik tarazlığında olan molekulyar fizikadakına bənzər ideal qaz kimi baxılır. Bu qazın məxsusi həcmi və elektronların bir-biri ilə qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmur. Hər bir

zərrəciyin halı altı kəmiyyətlə: üç x, y, z koordinatları və üç v_x, v_y, v_z sürət (və ya P_x, P_y, P_z impuls) toplananları ilə və ya iki \vec{r} və \vec{v} (və ya \vec{p}) vektorları ilə müəyyən olunur. Elektronların məxsusi həcmələrinin nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik olması böyük dəqiqliklə ödənilir, belə ki, klassik nəzəriyyəyə görə elektronların radiusu $r_0 \approx 10^{-15} \text{ m}$, həcmi isə ona müvafiq olaraq $V_0 \approx 10^{-45} \text{ m}^3$ -dir. Əgər elektronların konsentrasiyasının $n \approx 10^{28} \text{ m}^{-3}$ olduğunu qəbul etsək, onda sərbəst elektron qazına daxil olan elektronlar cismin ümumi həcmnin $b = nV_0 = 10^{28} \cdot 10^{-45} = 10^{-17}$ hissəsini tutmuş olurlar ki, bu da görüldüyü kimi çox kiçik kəmiyyətdir. Amma elektronlar arasındakı qarşılıqlı təsirin nəzərə alınmaması əsassız kimi görünür. Belə ki, elektronların yükü $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Kl}$, kristal qəfədə $r = 10^{-10} \text{ m}$ məsafədə onlar arasındakı Kulon qarşılıqlı təsir qüvvəsi $2 \cdot 10^{-8} \text{ N}$ tərtibində olduğundan, hər bir elektronun bu qüvvənin təsiri altında $2 \cdot 10^{22} \text{ m/san}^2$ təcil ala bildiyini, onlar arasındakı qarşılıqlı təsirin potensial enerjisinin isə kristal qəfəs daxilində $r = 10^{-10} \text{ m}$ məsafədə $\sim 14 \text{ eV}$ tərtibində olduğunu nəzərə alsaq, bu şərtin ödənilmədiyini görürük.

Elektronların kulon qarşılıqlı təsirinə (itələnmə) tam enerjisi belə yaxınlaşmada çox böyük qiymətə malik olmalıdır. Amma təcrübədən görüldüyü kimi, metallarda elektronların enerjisi, sonsuz uzaqlaşmış elektronların enerjisinə nəzərən mənfidir. Bu onunla əlaqədardır ki, elektronların bir-birindən kulon itələnmə qüvvələri ilə yanaşı, onların nüvələrlə qarşılıqlı cazibə qüvvələri də mövcuddur. Elektronların nüvələrlə qarşılıqlı təsir enerjiləri, onların özləri arasındakı qarşılıqlı təsir enerjiləri tərtibindədir. **Kristall qəfədə bütün elektronlar və nüvələrin yaratdıqları sahədə hərəkət edən elektron, həm itələmə, həm də cazibə qüvvələrinin təsirinə məruz qalır. Belə iki növ qüvvələrin eyni zamanda təsiri altında elektronun hərəkəti sərbəst hərəkət təsəvvürü yaradır. Gələcəkdə görəcəyimiz kimi, kvant mexanikasının qanunları belə yaxınlaşmaya əsas verir.**

Elektronlar kristall qəfədə xaotik hərəkətdədirlər. Bu hərəkət zamanı elektronlar kristall qəfəsin ionları ilə toqquşurlar və nəticədə onların sürətləri qiymət və istiqamətcə hər an dəyişir. Elektronların sürətinin qiymətcə dəyişməsi onun kinetik enerjisinin dəyişməsinə səbəb olur. Termodinamik tarazlıq halında elektron qazının temperaturu qəfədəki ionların temperaturuna bərabər olmalıdır. Bu isə o deməkdir ki, toqquşmalar nəticəsində nə elektron qazından qəfəs ionlarına, nə də qəfəs ionlarından elektron qazına orta hesabla enerji ötürülmür.

Amma, əgər elektron qazının temperaturunu dəyişsək, elektronlarla qəfəs ionları arasındakı enerji mübadiləsi hesabına qəfəsin temperaturu da

dəyişməlidir. Bu amil, sonralar istifadə edəcəyimiz kimi, metal və yarımqeçiricilərin elektron keçiriciliyinin izahında mühüm rol oynayır.

Qəfəslə toqquşmalar zamanı elektronların səpilməsinin təsadüfi xarakter daşması hesabına uzun müddət ərzində bir elektronun vektor kimi baxılan orta sürəti və onun orta yerdəyişməsi sıfıra bərabər olmalıdır. Bütün elektronlar eyni şəraitdə olduqlarından, bu şərt istənilən elektron üçün doğrudur. Beləliklə, nizamsız (xaotik) istilik hərəkətində olan elektronlar üçün orta yerdəyişmə vektoru sıfıra bərabər olduğundan, istilik hərəkəti elektrik cərəyanı, yəni hər hansı kəsikdən elektrik yükləri axımını yarada bilməz. Elektrik cərəyanı yaratmaq üçün yükdaşıyıcıların istiqamətlənmiş hərəkəti meydana çıxmalıdır.

Yükdaşıyıcıların belə istiqamətlənmiş hərəkəti elektrik sahəsi, temperatur qradienti, kristalın qeyri-bərabər işıqlanması və sairə kimi amillərin təsiri hesabına mümkün ola bilər.

Əgər metalda E intensivlikli elektrik sahəsi yaratsaq, onda hər bir elektrona $\vec{F} = eE$ kimi qüvvə təsir edir. Bu qüvvənin təsiri altında elektron

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} = \frac{e}{m} \vec{E} \quad (1.2.1)$$

təcilini alır. t müddəti ərzində elektronun əldə etdiyi sürət

$$\vec{v} = \vec{a}t = \frac{et}{m} \vec{E} \quad (1.2.2)$$

olub, sahənin əksinə yönəlir. Əgər elektronun başlanğıc sürəti \vec{v}_r olarsa, t anında onun sürəti

$$\vec{a}t + \vec{v}_r = \frac{et}{m} \vec{E} + \vec{v}_r \quad (1.2.3)$$

olar. Buradan görünür ki, elektronların sürətlərinin sahə istiqamətindəki toplananları kiçilir, sahənin əks istiqamətindəki toplananları isə, əksinə, böyüyür və nəticədə, bütövlükdə, bütün elektron qazı hər hansı istiqamətlənmiş hərəkət alır. Beləliklə, elektronların xaotik hərəkəti ilə yanaşı onların eyni zamanda bütövlükdə sahənin əksinə yönəlmiş əlavə hərəkəti meydana çıxır. **Elektrik sahəsində elektronların bütövlükdə istiqamətlənmiş hərəkəti dreyf, bu hərəkətin sürəti isə v_d - dreyf sürəti adlanır.** t - müddəti ərzində \vec{E} - intensivlikli elektrik sahəsinin təsiri altında elektron

$$\vec{z}(t) = \frac{et^2}{2m} \vec{E} \quad (1.2.4)$$

məsafəsinə yerini dəyişir.

Klassik elektron nəzəriyyəsində elektronun sürətinin dəyişməsinə onun kristall qəfəslə (atom və ya ionlarla) qarşılıqlı təsir aktının nəticəsi kimi baxılır. Başqa sözlə, elektronun qəfəs atomu və ya ionu ilə qarşılıqlı təsiri mexanikada zərrəciklərin toqquşmasına bənzədilir. Bu zaman elektronun iki ardıcıl toqquşma arasındakı məsafəni sərbəst zərrəcik kimi, qəfəsin və qalan digər elektronların təsirinə məruz qalmadan keçdiyi fərz olunur. Elektronun hərəkətini xarakterizə etmək üçün ℓ -sərbəst qaçış yolunun orta uzunluğu və buna sərf olunan τ -zaman fasiləsi anlayışları daxil edilir. τ -iki ardıcıl toqquşma arasındakı orta zaman fasiləsi, ℓ -isə orta qaçış məsafəsi mənasını kəsb edir.

Aydın ki, orta qaçış məsafəsi, orta qaçış müddəti ilə

$$\ell = v_T \tau \quad (1.2.5)$$

kimi münasibətdə olmalıdır. Burada v_T -istilik hərəkətinin orta sürətidir.

Yuxarıdakı mühakimələrdən orta dreyf sürətini təyin etmək olar.

$t=0$ anında elektronun istiqamətlənmiş hərəkət sürəti sıfıra bərabər olduğundan, $t= \tau$ anında uyğun olaraq

$$\bar{a} \tau = \frac{e\tau}{m} \bar{E} \quad (1.2.6)$$

yaza bilərik. Dreyf sürəti başlanğıc və son sürətilərin ədədi ortasına bərabər olmalıdır:

$$\bar{v}_d = \frac{0 + \bar{a} \tau}{2} = \frac{e\tau}{2m} \bar{E} \quad (1.2.7)$$

Bu ifadədən görünür ki, istiqamətlənmiş hərəkətin orta sürəti elektrik sahəsinin \bar{E} - intensivliyi ilə düz mütənasibdir. **Dreyf sürətini elektrik sahəsinin intensivliyi ilə əlaqələndirən kəmiyyət elektronların yürüklüyü adlanır və adətən μ hərfi ilə işarə olunur:**

$$\bar{v}_d = \mu \bar{E} \quad (1.2.8)$$

(1.2.8) və (1.2.7)-nin müqayisəsindən yürüklük üçün

$$\mu = \frac{e\tau}{2m} ; \quad (1.2.8a)$$

ifadəsini alırıq.

Buradan görünür ki, elektronların yürüklüyü ədədi qiymətə **vahid intensivlikli elektrik sahəsin də dreyf sürətinə bərabərdir.**

Elektronların konsentrasiyası n olarsa, onda vahid en kəsiyindən vahid zamanda keçən elektron seli elektrik cərəyanının sıxlığı olduğundan:

$$\vec{j} = ne\vec{v}_d = en\mu\vec{E} = \sigma\vec{E} \quad (1.2.9)$$

olar. Aldığımız bu tənlik differensial şəkildə Om qanununun ifadəsidir. Son ifadələrdən xüsusi elektrik keçiriciliyi üçün

$$\sigma = en\mu \quad (1.2.10)$$

və

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{2m} \quad (1.2.11)$$

alırıq. Son ifadə ilk dəfə olaraq **Drude** tərəfindən alınmışdır. Əgər τ -nu (1.2.5) ifadəsindən tapıb (1.2.11) –də yerinə yazsaq

$$\sigma = \frac{e^2 n \ell}{2m v_T} \quad (1.2.12)$$

alırıq.

Om qanunu yalnız o zaman ödənilir ki, yükdaşıyıcıların konsentrasiyası n və yürüklüyü μ elektrik sahəsinin intensivliyindən asılı olmasın. Belə sahələr **zəif elektrik sahələri** adlanır. Lakin sahə intensivliyi böyüdükcə elə an gəlib çatır ki, elektronların konsentrasiyası və yürüklükləri sabit qalmayıb, dəyişməyə başlayır. Belə elektrik sahələri **qüvvətli elektrik sahələri** adlanır. Qüvvətli elektrik sahələrində Om qanunundan kənara çıxmaların müşahidə olunması və bu da tamamilə yeni hadisələrin meydana çıxması ilə nəticələnir. Bunu yürüklüyün dəyişməsi misalında göstərək. Om qanununun çıxarılmasında biz fərz edirik ki, sərbəst qaçış yolunun sonunda qəfəsin ionu ilə toqquşmada elektron öz enerjisini tamamilə qəfəsə verir. Zəif elektrik sahələrində dreyf sürəti istilik hərəkətinin sürətindən çox-çox kiçikdir, ona görə də τ müddəti elektrik sahəsinin \vec{E} intensivliyindən asılı olmur. Amma elektrimk sahəsinin artması ilə dreyf sürəti də artır və elə an gəlib çatır ki, o, istilik hərəkətinin sürəti ilə eyni tərtibli olur. Bu halda sərbəst qaçış müddəti də

$$\tau = \frac{\ell}{v_T + v_d} \quad (1.2.13)$$

ifadəsinə müvafiq olaraq azalır, bu isə (1.8a) ifadəsindən görüldüyü kimi yürüklüyün, (1.2.11) –ə uyğun olaraq isə elektrik keçiriciliyinin azalmasına gətirib çıxarır. İstilik hərəkətinin v_T -sürəti, deməli, cismin temperaturu nə qədər kiçik, və eləcə də zəif sahələrdə yükdaşıyıcıların yürüklükləri nə qədər böyük olarsa, Om qanunundan kənara çıxmalara

müvafiq $\bar{E}_{böh}$ – böhran sahələrinin qiymətləri də daha kiçik olar.

Sərbəst qaçış müddətini başqa cür də təsvir etmək olar. Əgər hər hansı anda elektrik sahəsini yox etsək, onda elektronlar selinin istiqamətlənmiş hərəkəti, onların sahədə qazandıqları əlavə enerjilərini tamamilə kristall qəfəşə verib qurtarana qədər davam edəcəkdir. Bu istiqamətlənmiş hərəkət orta hesabla τ müddətindən sonra kəsilir və elektronların qarma- qarışıq (xaotik) istilik hərəkəti yenidən bərpa olunur. Beləliklə, mühakimələrdən görüldüyü kimi, **toqquşmalar elektronlar toplusunu tarazlıq halına gətirdiyi halda, elektrik sahəsi bu tarazlıq pozur. Hər hansı sistemin qeyri-tarazlıq halından tarazlıq halına keçməsi relaksasiya prosesi və ya relaksasiya, buna sərflənən müddət isə relaksasiya müddəti adlanır.** Başqa sözlə, relaksasiya müddəti dedikdə hər hansı səbəbdən pozulmuş tarazlığın bərpa müddəti başa düşülür. Buna müvafiq olaraq yuxarıda apardığımız mühakimələrə əsasən qeyd etmək olar ki, **sərbəst qaçış müddəti elə relaksasiya müddəti deməkdir.**

Beynəlxalq vahidlər sistemində (BS) elektrik keçiriliyi simenslə (Sm), xüsusi elektrik keçiriciliyi isə simens/metrə (Sm/m)) ölçülür. Onda BS-də yürüklüyün vahidi üçün (1.2.8) düsturuna uyğun olaraq

$$[\mu] = (A \cdot \text{san}^2) / \text{q}^{-1}$$

alırıq. Sürət və elektrik sahəsinin intensivliyi vahidlərindən istifadə edərək, yürüklük vahidini

$$[\mu] = \frac{m^2}{V \cdot \text{san}}$$

kimi göstərmək olar. Bu vahid daha geniş istifadə olunur.

§1.3. Sərbəst qaçış yolunun və müddətinin paylanma funksiyası

Bütün yükdaşıyıcılara uyğun sərbəst qaçış yolunun eyni olması şərtindən yürüklük və elektrik keçiriciliyi üçün aldığımız ifadələr heç də reallığı tam əks etdirmir, çünki, həqiqətdə müxtəlif yükdaşıyıcılar üçün bu müddət çox böyük intervalda, praktiki olaraq 0-dan ∞ -a qədər dəyişir. Buna görə təsadüfi qiymətlər baxımından sərbəst qaçış müddətinin tapılma ehtimalını müəyyən etmək lazım gəlir. Sərbəsti qaçış müddətinin paylanma funksiyasını tapan. Bunun üçün fərz edək ki,

- 1) elektron üçün dt zaman intervalında toqquşmaya (səpilməyə) məruz qalma ehtimalı, dt intervalı ilə düz mütənəsibdir;
- 2) vahid zamanda toqquşma (səpilmə) ehtimalı zamana görə sabit kəmiyyətdir;

DOVLƏT UNIVERSİTETİ
KİTABXANA

Bu iki şərt sərbəst qaçış yolunun paylanma funksiyasını müəyyən etmək üçün kifayətdir. Zərrəciyin t , $t+dt$ zaman intervalında toqquşmaya məruz qalmadan hərəkət etmə ehtimalını

$$d\varpi = d\varpi(dt) \quad (1.3.1)$$

ilə işarə edək. $\varpi(t)$ kəmiyyəti (t , $t+1$), $\varpi(t+dt)$ isə $t+dt$, $t+dt+1$ zaman intervalında zərrəciyin sərbəst hərəkət ehtimalıdır. $\varpi(t+dt)$ kəmiyyətini iki cür ifadə etmək olar. Bir tərəfdən

$$\varpi(t+dt) = \varpi(t) + \frac{d\varpi}{dt} dt \quad (1.3.2)$$

digər tərəfdən isə $t+dt$ müddəti ərzində sərbəst hərəkət taktını- C hadisəsini iki hadisənin hasilini kimi ifadə etmək olar; t - müddəti ərzində sərbəst hərəkət -A hadisəsi və dt -müddəti ərzində sərbəst hərəkət - B hadisəsi :

$$C=AB \quad (1.3.3)$$

İki hadisənin hasilinin ehtimalı bir hadisənin ehtimalının digərinin şərti ehtimalı hasilinə bərabərdir:

$$\varpi(C) = \varpi(A)\varpi\left(\frac{B}{A}\right) = \varpi(B)\varpi\left(\frac{A}{B}\right) \quad (1.3.4)$$

A hadisəsi B hadisəsindən asılı olmadığından, $\varpi(A/B) = \varpi(A)$ yazıla bilər. Bununla yanaşı B hadisəsi də A hadisəsindən asılı deyil, ona görə də

$$\varpi(t+dt) = \varpi(t)d\varpi(dt) \quad (1.3.5)$$

yazmaq olar.

dt müddətində sərbəst hərəkət ehtimalını həmin müddət ərzində səpilmə ehtimalı ilə də ifadə edə bilərik. Vahid zaman ərzində səpilmə (toqquşma) ehtimalı adt , sərbəst hərəkət ehtimalı isə $1-adt$ olduğundan,

$$d\varpi(dt) = 1 - adt \quad (1.3.6)$$

alırıq. (1.3.2), (1.3.5) və (1.3.6) ifadələrindən alırıq:

$$\varpi(t+dt) = \varpi(t) + \frac{d\varpi}{dt} dt = \varpi(t)[1 - adt] = \varpi(t) - \varpi(t)adt \quad (1.3.7)$$

bu da $\varpi(t)$ funksiyası üçün

$$\frac{d\varpi}{dt} = -\varpi a \quad (1.3.8)$$

diferensial tənliyinə gətirir. Bu tənliyi həll edərək

$$(1.3.9)$$

alırıq. c sabiti normalaşma şərtindən tapıla bilər:

$$\int_0^{\infty} \varpi(t) dt = 1 = c \int_0^{\infty} a^{-at} dt = \frac{c}{a} \quad (1.3.10)$$

burada

$$s = a \quad (1.3.11)$$

olar.

Beləliklə, normalaşmış sərbəst qaçış müddətinin paylanma funksiyası

$$\varpi(t) = ae^{-at} \quad (1.3.12)$$

şəklində alınır.

İndi isə sərbəst qaçış müddətinin orta qiymətini $\langle t \rangle$ tapaq:

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} t \varpi(t) dt = \int_0^{\infty} t a e^{-at} dt = \frac{1}{a} \quad (1.3.13)$$

Orta qaçış müddətini τ ilə əvəz etsək, $\langle t \rangle = \tau$, onda (1.2.13)-ə uyğun olaraq alırıq ki, **vahid zamanda toqquşma ehtimalı orta sərbəst qaçış müddətinin tərs qiymətinə bərabərdir:**

$$a = \frac{1}{\tau} = \tau^{-1} \quad (1.3.14)$$

Onda vahidə normalaşmış paylanma funksiyası

$$\varpi(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (1.3.15)$$

kimi yazıla bilər.

Analoji qaydada ℓ sərbəst qaçış yolunun $\varpi(x)$ paylanma funksiyasını da tapmaq olar:

$$\varpi(x) = \frac{1}{\ell} e^{-\frac{x}{\ell}} \quad (1.3.16)$$

Aldığımız paylanma funksiyaları ən ümumi hallar üçün ödənilir. Onları elektronun elektrik sahəsində hərəkəti halına tətbiq edək. Bu zaman biz yalnız elektronların sahənin əksinə istiqamətlənmiş hərəkətini nəzərdən keçirəcəyik. Fərz edək ki, x oxu sahə intensivliyi istiqamətindədir. Elektron, sahədə $\frac{eE}{m}$ təcili ilə hərəkət edərək, t -sərbəst qaçış müddəti ərzində

$$\vec{v}(t) = \frac{eE}{m} t \quad (1.3.17)$$

sürətini qazanır və bu zaman x yolunu qət edir:

$$x = \frac{eE}{2m} t^2 ; \bar{x} = \frac{et^2}{2m} \bar{E} \quad (1.3.18)$$

Dreyf hərəkətinin orta sürəti

$$\bar{v}_d = \int_0^{\infty} \bar{v}(t) w(t) dt = \frac{e\bar{E}}{m_0} \int_0^{\infty} t e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{dt}{\tau} = \frac{e\tau}{m} \bar{E} , \quad (1.3.19)$$

Sahənin əksinə orta yerdəyişmə isə

$$\bar{l} = \int_0^{\infty} \bar{x}(t) w(t) dt = \frac{e\bar{E}}{2m_0} \int_0^{\infty} t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{dt}{\tau} = \frac{e\tau^2}{m} \bar{E} \quad (1.3.20)$$

olar. Buradan görünür ki, dreyf sürəti

$$\bar{v}_d = \frac{e\tau}{m} \bar{E} = \mu \bar{E} , \quad (1.3.21)$$

kimidir. Burada

$$\mu = \frac{e\tau}{m} \quad (1.3.22)$$

elektronların yürüklüyüdür.

Yürüklüyün (1.3.22) ifadəsi (1.2.8) ifadəsindən 2 vuruğu ilə fərqlənir. Bu onunla əlaqədardır ki, (1.3.22) müddətinə müvafiq hərəkətlər nəzərə alınmışdır. Bu orta yerdəyişmənin ifadəsindən daha aydın nəzərə çarpır, belə ki, o, $\frac{e\tau^2}{2m} \bar{E}$ deyil,

$$\langle \bar{x} \rangle = \frac{e\tau^2}{m} \bar{E} \quad (1.3.23)$$

kimidir. Bütün hallarda

$$\langle t^2 \rangle \geq \langle t \rangle^2 \quad (1.3.24)$$

olduğundan, baxılan hal üçün

$$\langle t^2 \rangle = 2 \langle t \rangle^2 = 2\tau^2 \quad (1.3.25)$$

alarıq.

Dediyimizi ümumiləşdirərək belə bir sadə, amma çox mühüm qənaətə gəlmək olar: τ orta qaçış müddəti və ya iki toqquşma arasındakı müddətdir. O, dreyf hərəkətinin sürəti ilə deyil, sərbəst qaçış yolunun uzunluğu və zərrəciyin tam sürəti ilə təyin olunur. Tam sürət zərrəciyin enerjisindən asılıdır və bunun üçün də **sərbəst qaçış müddəti zərrəciyin enerjisinin funksiyasıdır**. Əgər sərbəst qaçış yolunun özü də enerjiden asılı olarsa, bu asılılıq daha da mürəkkəbləşir. Ona görə də dreyf sürətinin

və digər xarakteristik parametrlərin təyində sərbəst qaçış müddəti və başqa kəmiyyətlərin qiymətlərini elektronların enerjiyə görə paylanma funksiyasını nəzərə almaqla ortalaşdırmaq lazım gəlir.

§1.4. Sadə və mürəkkəb kristal qəfəslər

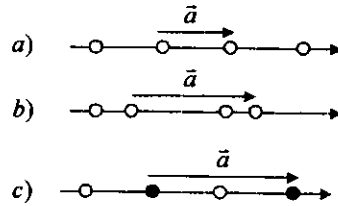
Əksər bərk yarımkeçiricilər və bərk metallar kristallik quruluşa malikdirlər, başqa sözlə bu maddələri təşkil edən atomlar toplusu fəzada müəyyən qanunauyğunluqla düzülüb olur. Fəzada atomların nizamlı düzülüşü dedikdə biz **fəza periodikliyi** və ya **translasiya simmetriyası** xassələrini başa düşürük. Bu qanunauyğunluqları təsvir etmək üçün kristal qəfəs anlayışından istifadə olunur. Kristal qəfəsi üç ölçülü tor kimi təsəvvür etmək olar. Atomlar (ionlar və ya molekullar) bu torun düyün nöqtələrində yerləşmiş olur. Qeyri-komplanar (bir müstəvi üzərində olmayan) elə üç \vec{a}_1, \vec{a}_2 və \vec{a}_3 vektorları təsəvvür etmək olar ki, kristal boyu bu vektorları, onların tam misilləri qədər sürüşdükdə özləri ilə üst-üstə düşmə (təkrarlanma) baş verir. Bu zaman biz istilik hərəkətini və hər bir real kristal məhdud olduğundan, kənar səthlərin mövcudluğunu nəzərə almırıq. Görəcəyimiz kimi, $\vec{a}_i (i = 1, 2, 3)$ vektorlarının istiqamətləri qəfəsdə müxtəlif cür seçilə bilər. Digər tərəfdən, kristal \vec{a}_i -nin tam misillərinə bərabər vektorlar qədər sürüşdükdə o, öz-özü ilə üst-üstə düşür. Bundan sonra \vec{a}_i -vektorları dedikdə seçilmiş istiqamət üzrə periodikliyi ödəyən ən kiçik \vec{a} vektorları başa düşəcəyik. Belə seçimdə

\vec{a}_i vektorları **translasiya, miqyas** və ya **əsas vektorlar**, eləcə də kristal qəfəsin **translyasiya periodu** adlanır. Üç \vec{a}_i vektorları üzərində qurulmuş paralelepiped **elementar** və ya **kristal özək** adlanır. \vec{a}_1, \vec{a}_2 və \vec{a}_3 vektorlarını sağ koordinat sistemində x, y və z oxlarının müsbət istiqamətləri üzrə yönəldəcəyik. Onda sağ koordinat sistemində vektorial hasilə əsasən elementar özəyin həcmi

$$\Omega = (\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3]) = (\vec{a}_3, [\vec{a}_1, \vec{a}_2]) = (\vec{a}_2, [\vec{a}_3, \vec{a}_1]) \quad (1.4.1)$$

kimi ifadə etmək olar.

Elementar özəkdə atomların paylanması (düzülüşü) müxtəlif maddələr üçün müxtəlifdir. Atomlar paralelepipedin təpə nöqtələrində, üzlərində və fəza diaqonallarının kəsişmə nöqtələrində yerləşir. Çoxlu



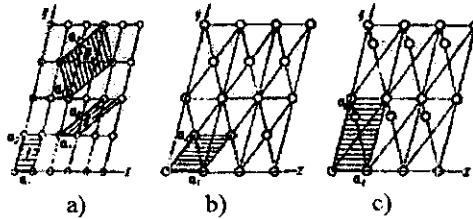
Şəkil 1.4. Xətti (birölçülü) qəfəslər

sayda belə elementar özkələri nizamla bir-birinə kip düzsək, ideal monokristal almış olarıq.

Kristal qəfəsin həndəsi xassələrini ən sadə qəfəs-xətti qəfəsdən (biröçlülü) başlayaraq nəzərdən keçirək. Belə qəfəsdə zərrəciklər sonsuz xətt boyunca periodik düzülürlər. Belə qəfəsi bir atomu və ya atomlar qrupunu bir xətt boyunca eyni a parçaları qədər ardıcıl sürüşdürməklə əldə etmək olar. Xətti qəfəs halında biz yalnız bir $|\vec{a}_1| = a$ translyasiya vektoruna malik oluruq və belə qəfəsin həcmi Ω_0 bu parçanın uzunluğuna bərabərdir: $\Omega_0 = a$.

Şəkil 1.4-də üç müxtəlif xətti qəfəs göstərilmişdir. Ağ və qara dairəciklər müxtəlif növ atomları təsvir edirlər. Periodikliyin ödənilməsi şərtindən görüldüyü kimi, a) halında xətti qəfəs bir, b) və c) hallarında isə iki atomdan ibarət olur. Buna müvafiq olaraq a) qəfəsi sadə və ya primitiv b) və c) qəfələri isə mürəkkəb qəfəslər adlanır.

1.3-a şəklində atomları paraleloqramların təpə nöqtələrində yerləşmiş müstəvi qəfəs təsvir olunmuşdur. Bu qəfəs 1.4-a şəklindəki sadə xətti qəfəsi müstəvi üzərində bərabər məsafələrə paralel sürüşdürməklə alınabilir. Şəkildən görüldüyü kimi, \vec{a}_1 və \vec{a}_2 translyasiya vektorlarının seçimi birqiyətli deyil. I və II elementar qəfəslərinə bir atom daxildir və onların həcmi $\Omega_0 = |\vec{a}_1 \vec{a}_2|$, ştrixlənmiş paraleloqramların sahələrinə bərabər olub, eynidir. III elementar qəfəyə isə üç atom daxildirsə, buradan görünür ki, sadə qəfəsdə də birdən çox atom daxil olan elementar özkə qurmaq olar.



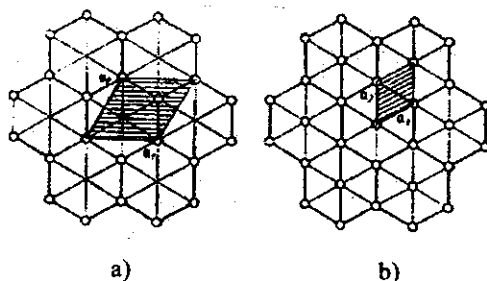
Şəkil 1.5. Müstəvi qəfəslər

Əgər əsas \vec{a}_i vektorları elə seçilibsə ki, qəfəsin istənilən translyasiyası n_i nin tam sayılı $\sum n_i \vec{a}_i$ qiymətləri ilə təsvir oluna bilsin, onda \vec{a}_i üzərində qurulmuş elementar özkə primitiv özkə adlanır. I və II özkələri primitiv, III isə qeyri-primitivdir. Həqiqətən də axırıncı halda x oxu boyunca bir (iki) minimal translyasiyada $n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2$,

$n_1 = n_2 = \frac{1}{3} (= \frac{2}{3})$. Əgər primitiv özgəyə bir atom daxildirsə, özək sadə, birdən çox atom daxildirsə-mürəkkəb adlanır. Bu hal üçölçütlü qəfəslərə də aiddir.

Beləliklə, 1.5,a şəklindəki qəfəs sadə qəfəsidir.

1.5,b şəklində başqa bir sadə qəfəs təsvir olunmuşdur. Bu qəfəs 1.5,a şəklindəki qəfəsdə paraleloqramların diaqonallarının kəsişmə nöqtələrində eyni növ atomlar yerləşdirsək, 1.5,b-dəki qəfəsi alarıq. Belə qəfəsdə primitiv özək ştrixlənmiş hissə kimi seçilə bilər. Əgər diaqonalların kəsişmə nöqtələrindəki atomları eyni cür sürüşdürsək, onda 1.5,c-də təsvir olunan kimi iki atomlu primitiv özək alınır. 1.5,b şəklindəki paraleloqramların kəsişmə nöqtələrində özge növ atomlar yerləşdirsək, mürəkkəb qəfəs alınır, çünki bu halda qəfəsin düyünləri ekvivalent olmur.



Şəkil. 1.6. Simmetrik müstəvi qəfəslər

1.6,a şəklində simmetrik müstəvi qəfəs təsvir olunmuşdur. \vec{a}_1 və \vec{a}_2 vektorları üzərində qurulmuş primitiv özəyə iki atom daxildir. Amma altıbucaqlıların diaqonallarının kəsişmə nöqtələrinə eyni cür atomlar yerləşdirsək, sadə qəfəs alarıq (Şəkil 1.6,b).

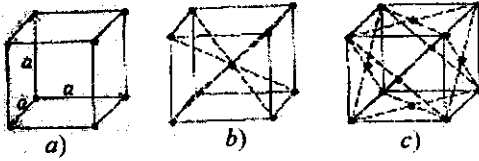
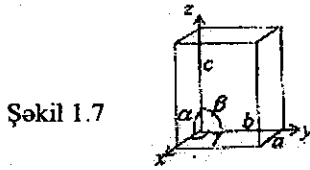
§1.5. Kristallik sistemlər. Brave qəfəsləri

Bərk cisimləri təşkil edən nüvələr fəzada müəyyən bir nizamla düzülərək kristall qəfəs təşkil edirlər. Bu qəfəslərin əsasında paralelepiped şəklində həndəsi fiqur durur. Paralelepipedin bir tərəfində kəsişən üç tərəfin uzunluqlarını a, b, c , bu tərəflər arasındakı bucaqları isə $\hat{a}c = \alpha$, $\hat{b}c = \beta$ və $\hat{a}b = \gamma$ ilə işarə edək (şəkil 1.7.).

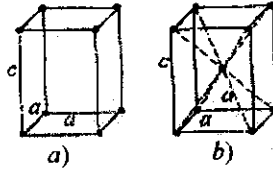
Üçölçütlü metallik qəfəs halında kristall özəyin a, b, c tilləri və α, β, γ bucaqlarının qiymətindən asılı olaraq mümkün 14 növ kristall quruluşunu

7 sisteme və ya sinqoniyaya ayırmaq olar. Bu yeddi kristall sistemine daxil olan 14 kristal qəfəs **Brave qəfəsləri** adlanır.

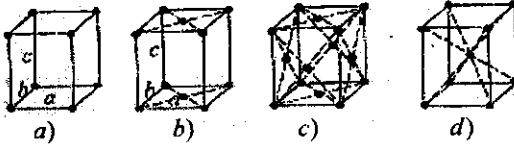
1. Düzgün və ya kubik sinqoniya (şəkil 1.8). Bu halda $\alpha = \beta = 90^\circ$, $a = b = c$. Bu sistemdə üç cür qəfəs mümkündür: sadə (şəkil 1.8 a), həcmə mərkəzləşmiş (şəkil 1.8.b) və səthə mərkəzləşmiş (şəkil 1.8.c).



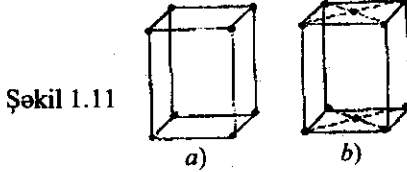
Şəkil 1.8



Şəkil 1.9



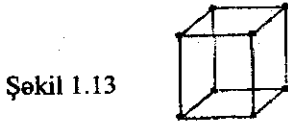
Şəkil 1.10



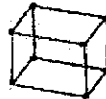
Şəkil 1.11



Şəkil 1.12



Şəkil 1.13



Şəkil 1.14

2. Tetraqonal və ya kvadratik sinqoniya. Burada elementar özək oturacağı kvadrat olan düzbucaqlı paralelepipeddir (şəkil 1.9) $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ və $a = b \neq c$. Bu sistemdə sadə (1.9 a) və həcmə mərkəzləşmiş (şəkil 1.9 b) qəfəs mövcuddur.

3. Rombik və ya ortoqonal sistem. Burada $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, $a \neq b \neq c$, yəni elementar özək tilləri müxtəlif olan düzbucaqlı paralelepipeddir. Burada dörd cür qəfəs mövcuddur (şəkil 1.10): sadə (a), bazaya mərkəzləşmiş (b), həcmə mərkəzləşmiş (d) və səthə mərkəzləşmiş (c).

4. Monoklin sistem: $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$ və $a \neq b \neq c$ (şəkil 1.11). Bu sistemdə elementar özək mail paralelepiped olub, iki cüt üzü düzbucaqlı və bir cüt üzü isə paraleloqramdır. Bu sinqoniyada iki cür: sadə (a) və bazaya mərkəzləşmiş (b) qəfəs mümkündür.

5. Romboedrik və ya triqonal sistem: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ və 120° -dən kiçikdir. Deməli, bu sistemdə elementar özək romboedrdir (şəkil 1.12). Bu sinqoniyada yalnız bir növ primitiv qəfəs mövcuddur.

6. Heksaqonal sistem (sinqoniya) (şəkil 1.13). Bu sistemdə $\alpha = 120^\circ$, $\beta = \gamma = 90^\circ$, $a = b \neq c$. Burada üç sadə özək birlikdə altüzlü prizma əmələ gətirir ki, bu da sinqoniyanın elementar özəyi olur (belə özəyin simmetriya elementləri daha çoxdur). Burada da görünür ki, sinqoniyanın elementar özəyi heç də həmişə sadə özəkdən ibarət olmur.

7. Triklin sistem. Bu sistemdə bütün tillər və bucaqlar müxtəlifdir, yəni $\alpha \neq \beta \neq \gamma$, $a \neq b \neq c$ (şəkil 1.14). Burada yalnız bir növ qəfəs mövcuddur.

Qeyd etmək lazımdır ki, çox vaxt real kristallarda elə quruluşlara təsadüf olunur ki, onları bir Brave qəfəsi ilə təsvir etmək mümkün deyil. Bu cür quruluşlar bir-birinin içərisinə geydirilmiş (bir-birinə nəzərən sürüşdürülmüş) bir neçə Brave qəfəsi ilə təsvir olunur.

§1.6. Kristalda müstəvilərin və istiqamətlərin göstərilməsi.

Miller indeksləri

Kristalda identik yerlərdə yerləşən düyün nöqtələrindən və ya atomlardan müstəvilər keçirmək olar. Bu zaman eyni cür müstəvilərdən ibarət müxtəlif müstəvilər ailəsi alınır. Aydındır ki, hər bir müstəvini fəzada təsvir etmək üçün onun koordinat oxları ilə kəsişmə nöqtələrini bilmək kifayətdir. Bu məqsədlə Miller indekslərindən istifadə edirlər. Bundan ötrü koordinat sisteminin başlanğıcı elementar kristal özəyinin düyün nöqtələrindən birində yerləşdirilir, koordinat oxları isə paralelepipedin tilləri boyunca yönəldilir. Belə olduqda istənilən müstəvini onun koordinat oxları ilə kəsişdiyi üç nöqtə ilə xarakterizə

etmək olar (şəkil 1.15). Bu zaman hər bir koordinat oxu boyunca miqyas vahidi olaraq paralelepipedin uyğun tilinin uzunluğu götürülür. Deməli, ümumiyyətlə oxlar üzrə miqyaslar müxtəlifdir.

Tutaq ki, P müstəfisi koordinat oxları ilə kəsişərək oxlardan uyğun miqyaslarda m, n və p parçalarını ayırmışdır: $m = \frac{OA}{a}$, $n = \frac{OB}{b}$, $p = \frac{OC}{c}$. Aydındır ki, bu üç ədəd, P müstəvisini tamamilə xarakterizə edir.

Əgər bu ədədlərin ters qiymətlərini $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$ nisbətinin ən kiçik üç h, k, l tam

ədədin nisbətində gətirsək $\left(\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = h : k : l \right)$,

aldığımız bu h, k, l ədədləri də həmin P müstəvisini xarakterizə edəcək. Beləliklə, h, k, l ədədlərinə P müstəvisinin **Miller indeksləri** deyilir.

Məsələn, $m=4$, $n=2$, $p=3$, olarsa onda

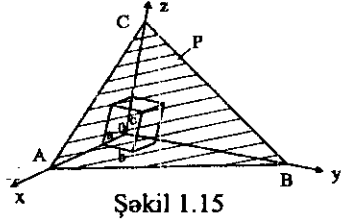
$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{1}{4} : \frac{1}{2} : \frac{1}{3} = \frac{3}{12} : \frac{6}{12} : \frac{4}{12} = 3 : 6 : 4$; deməli, $h=3$, $k=6$, $l=4$. Onda P

müstəvisinin Miller indeksləri 3, 6, 4 olacaqdır. Miller indekslərini belə göstərirlər: (hkl) . Koordinat oxundan müstəvinin kəsdiyi parça mənfidirsə, onda uyğun Miller indeksi də mənfəi olur. Mənfəi işarəni indeksin üstündə göstərmək qəbul edilmişdir, məsələn, $-h, -k, -l$ olduqda belə yazılır: $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$. Verilmiş müstəvi koordinat oxlarından hər hansı birinə paraleldirsə və ya onunla üst-üstə düşürsə, onda uyğun Miller indeksi 0

olacaq (kəsişmə nöqtəsi sonsuzluqdadır): $\frac{1}{\infty} = 0$.

Qeyd etmək lazımdır ki, Miller indeksləri yalnız bir müstəvini deyil, bir-birinə paralel olan müstəvilər ailəsini xarakterizə edir (koordinat başlanğıcının seçilməsi ixtiyari olduğundan onu başqa düyün nöqtələrində seçməklə paralel müstəvilər ailəsinin hər biri üçün eyni m, n, p ədədlərini almaq mümkündür). Ona görə də, məsələn, (hkl) və $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ eyni müstəvilər ailəsindəndir (bir-birinə paraleldir).

Müstəvi koordinat başlanğıcından keçirsə, onda ona paralel olan başqa bir müstəvini götürmək (başqa sözlə, həmin müstəvini fəzada özünə paralel köçürmək) və bunun üçün Miller indekslərini yuxarıda göstərdiyimiz qayda ilə təyin etmək lazımdır.



Şəkil 1.15

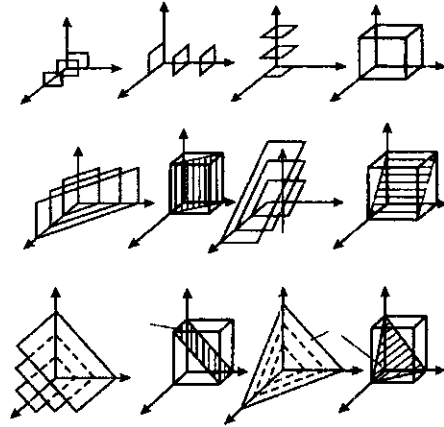
Götürülmüş müstəvinin koordinat oxlarından ayırdığı parçalar yalnız tam ədədlə deyil, kəsr ədədlərlə də verilə bilər.

Məsələn, $m=1$, $n=8$; $p=\frac{1}{3}$. Bu halda

da Miller indeksləri eyni qayda ilə təyin edilir:

$\frac{1}{1} : \frac{1}{1/2} : \frac{1}{1/3} = 1:2:3$, yeni $h=1$,

$k=2$, $l=3$ Məsələn, sadə kubik kristal qəfəsi üçün əsas müstəvilər və onların uyğun Miller indeksləri 1.16-cı şəkildə göstərilmişdir.

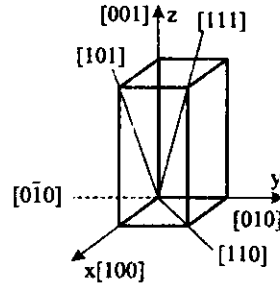


Şəkil 1.16

Kubun üzərini təşkil edən (100), (010) və başqa ekvivalent müstəvilərə **kub müstəviləri**, kubun qarşı üzlərinin uyğun diaqonallarından keçən (110), (011) və s. ekvivalent müstəvilərə **rombik dodekaedr müstəviləri**, (111) və ona ekvivalent olan başqa müstəvilərə isə **oktaedr müstəviləri** deyilir.

Ekvivalent müstəvilər ailəsi böyük mötərizə içərisində göstərilir. Məsələn, kubun üzərini təşkil edən (100), (001), (100) və s. ekvivalent müstəvilər ailəsi {100} kimi göstərilir.

Kristal qəfəsdə düyün nöqtələrindən keçən istənilən oxun da istiqaməti indekslərlə göstərilir. Bunun üçün verilən oxa (və ya istiqamətə) paralel olmaqla, kristal qəfəsin istənilən iki düyün nöqtəsini birləşdirən bir vektor tapmaq və onun koordinat oxları üzrə proyeksiyalarını uyğun olaraq a, b və c miqyaslarında təyin etmək lazımdır. Bu proyeksiyaların (özlərinin) nisbətini üç ən kiçik tam ədədlərin nisbətinə gətirmək lazımdır. Tutaq ki, bu ədədlər u, v və w -dir. Bu ədədlər həmin götürülmüş istiqamətin (oxun) indeksləri olacaq. Müstəvidən fərqli olaraq oxun indeksləri orta mötərizə içərisində göstərilir: $[uvw]$. Məsələn, x oxunun müsbət istiqaməti $[100]$, mənfi istiqaməti isə $[-100]$ kimi göstərilir (şəkil 1.17). Ekvivalent istiqamətlər ailəsi belə $\langle uvw \rangle$ kimi göstərilir.



Şəkil 1.17

Kubik sistemdə $h = u, k = v, l = w$ olarsa, $[uvw]$ istiqaməti (hkl) müstəvisinə perpendikulyardır. Başqa sinqoniyalar üçün bu qanunauyğunluq ödənilmir.

Yuxarıda qəbul olunan işarələr heksaqonal sistemdən başqa bütün sinqoniyalarda tətbiq edilir. Bunun üçün heksaqonal sistemdə dördöxlü koordinat sistemindən istifadə olunur. Koordinat başlanğıcı altüzlü prizmanın oturmaqlarından birinin mərkəzində seçilir. (şəkil 1.18), x_1, x_2 və x_3 oxları bir-biri ilə 120° -lik bucaq altında kəşşir, z oxu isə bunlara perpendikulyar götürülür.

Müstəvinin koordinat oxlarından ayırdığı parçalar uyğun olaraq m, n, p və q -dürsə, onda indekslər yenə də əvvəlki, qayda ilə təyin olunur:

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} : \frac{1}{q} = h : k : i : l. \quad \text{Onda verilmiş}$$

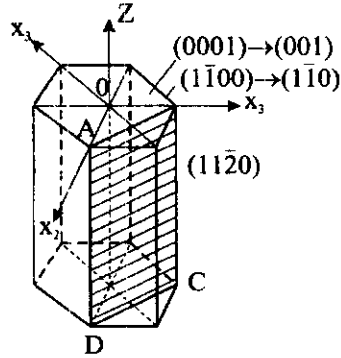
müstəvinin indeksləri $(hkil)$ olacaq. Buna Miller-Brave indeksləri deyilir. Qeyd etmək lazımdır ki, bu sistemdə x_1, x_2 və x_3 oxları üzrə miqyaslar eyni olduğu üçün həmişə $i = -(h + k)$ olur (bunu 1.18-ci şəkil üzərində asanlıqla sübut etmək olar), yəni birinci iki indeks məlumdursa, üçüncü indeks tapmaq üçün onları toplayıb, alınan cəmi əks işarə ilə götürmək lazımdır. Ona görə də çox vaxt heksaqonal sistemdə də Miller-Brave indeksindən istifadə olunur:

$$(hkil) \rightarrow (hkl).$$

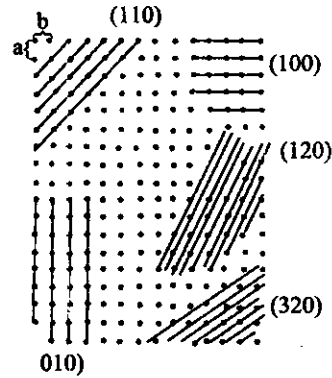
1.18-ci şəkildə heksaqonal sistem üçün bir neçə müstəvinin Miller-Brave indeksləri göstərilmişdir. z oxuna perpendikulyar olan (0001) müstəvisinə bazis müstəvisi deyilir. $\{10\bar{1}0\}$ ekvivalent müstəvilər ailəsinə (altüzlü prizmanın yan üzlərinə) birinci vəziyyət prizması, $\{1\bar{1}20\}$ ekvivalent müstəvilər ailəsinə isə ikinci vəziyyət prizması deyirlər.

Dördöxlü koordinat sistemində oxların istiqamətlərini indekslərlə göstərmək mürəkkəb olduğu üçün heksaqonal sistemdə də istiqamətlər Miller indeksləri ilə (üç indekslə) göstərilir.

Qeyd edək ki, Miller indekslərinin ədədi qiymətləri böyüdükcə



Şəkil 1.18



Şəkil 1.19

müstəvilər ailəsində iki ən yaxın (qonşu) müstəvi arasındakı məsafə kiçilir. 1.19-cu şəkildə XOY müstəvisində atomların vəziyyəti və şəkil müstəvisinə perpendikulyar olan birneçə paralel müstəvilər ailəsi göstərilmişdir. Müstəvilər arasındakı məsafənin indekslərdən asılı olaraq dəyişməsi burada əyani şəkildə görünür. Doğrudan da, indekslər böyüdükcə paralel müstəvilərin sıxlığı da artır.

§ 1.7. Tərs kristal qəfəs

Kristal qəfəsin əsas xassəsi ondan ibarətdir ki, onun daxilində atomların düzülüşü müəyyən periodikliyə malikdir. Bu o deməkdir ki, əgər kristalı bütünlüklə bir \vec{a}_n vektoru

$$\vec{a}_n = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (1.7.1)$$

qədər sürüdürsək, o, yenə də özünün üzərinə düşəcəkdir. Burada $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, ədədi qiymətə elementar kristal özəyin uyğun tillərinə bərabər olub, onların müsbət istiqaməti üzrə yönəlmiş vektorlar, n_1, n_2, n_3 isə tam (müsbət və mənfi) ədədlərdir. $a_i (i=1,2,3)$ vektorlarına translyasiya və ya bazis vektorlar deyilir.

Ayındır ki, kristal daxilində elektrostatik potensial, elektron buludunun sıxlığı və s. kimi kəmiyyətlər üçölçülü periodikliyə malikdirlər. Doğrudan da kristal daxilində \vec{r} və $\vec{r} + \vec{a}_n$ vektorları ilə xarakterizə olunan nöqtələr ekvivalentdir. Ona görə də, məsələn, elektrostatik potensial üçün

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{a}_n), n=1,2,3... \quad (1.7.2)$$

şerti ödənilir.

İndi $\vec{a}_i (i=1,2,3)$ vektorlarından istifadə edib, belə üç yeni vektor seçək:

$$\vec{b}_1 = \frac{[\vec{a}_2, \vec{a}_3]}{(\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3])}; \vec{b}_2 = \frac{[\vec{a}_3, \vec{a}_1]}{(\vec{a}_2, [\vec{a}_3, \vec{a}_1])}; \vec{b}_3 = \frac{[\vec{a}_1, \vec{a}_2]}{(\vec{a}_3, [\vec{a}_1, \vec{a}_2])}, \quad (1.7.3)$$

burada hər üç vektorun məxrəcindəki ifadə bazis vektorların qarışıq hasilidir. Məlumdur ki, bu hasil həmin $a_i (i=1,2,3)$ vektorları üzərində qurulmuş paralelepipedin (yəni elementar özəyin) həcminə bərabərdir. Onu Ω_0 ilə işarə edək:

$$\Omega_0 = (\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3]) \quad (1.7.4)$$

(1.7.3)-dən görünür ki, $b_i (i=1,2,3)$ vektorlarının ölçü dərəcəsi uzunluq ölçüsünün tərsinə bərabərdir. Məsələn, kubik sinqoniya üçün $a_1 = a_2 = a_3 = a$ olduğundan $b_1 = b_2 = b_3 = b$, $b = \frac{1}{a}$ alarıq. $a = 1$ sm götürsək,

$b = 1 \frac{1}{sm}$ olar.

Aydındır ki, $\vec{b}_i (i=1,2,3)$ vektorları üzərində də paralelepiped qura bilərik. Çoxlu sayda belə paralelepipedləri hər üç istiqamətdə nizamlan-yana düzsək, onda, kristal qəfəsdə olduğu kimi, yenə də üçölçülü tor alarıq. Bu cür üçölçülü toru **tərs kristal qəfəs** adlandıracağıq. Deməli, tərs kristal qəfəsində $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ bazis (və ya translyasiya) vektorlarıdır. $\vec{b}_i (i=1,2,3)$ -lərin üzərində qurulan paralelepipedə tərs kristal qəfəsinin elementar özəyi deyəcəyik. Tərs kristal qəfəsinin istənilən iki düyün nöqtəsini birləşdirən vektora tərs kristal qəfəsin vektoru deyirlər. Ümumi şəkildə bu vekturu belə ifadə edə bilərik:

$$\vec{b}_g = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3 \quad (1.7.5)$$

burada g_1, g_2 və g_3 tam ədədlərdir.

Beləliklə, \vec{a}_n düz, \vec{b}_g isə tərs kristal qəfəsinin vektorlarıdır.

Göstərmək olar ki, tərs kristal qəfəsin elementar özəyinin həcmi düz kristal qəfəsinin elementar özəyinin həcmnin tərs qiymətinə bərabərdir:

$$(\vec{b}_1 [\vec{b}_2 \vec{b}_3]) = \frac{1}{\Omega_0} \quad (1.7.6)$$

(1.7.3)-dən aydındır ki

$$(\vec{a}_i, \vec{b}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad (1.7.7)$$

Onda:

$$\begin{cases} (\vec{b}_g, \vec{a}_i) = (g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3, \vec{a}_i) = g_i (\vec{b}_i, \vec{a}_i) = g_i, \\ (\vec{b}_g, \vec{a}_2) = g_2, \\ (\vec{b}_g, \vec{a}_3) = g_3. \end{cases} \quad (1.7.8)$$

Deməli,

$$(\vec{a}_n, \vec{b}_g) = n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3 = N, \quad (1.7.9)$$

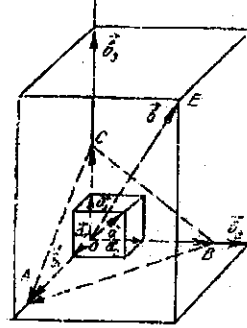
burada N - tam ədəddir. Göründüyü kimi düz və tərs kristal qəfəs vektorlarının skalyar hasilini tam ədədə bərabərdir.

(1.7.3) ifadəsindən görünür ki, \vec{b}_1 vektoru \vec{a}_2 və \vec{a}_3 vektorlarına, \vec{b}_2 vektoru \vec{a}_1 və \vec{a}_3 , \vec{b}_3 isə \vec{a}_1 və \vec{a}_2 vektorlarına perpendikulyardır. Ona görə də \vec{b}_j, \vec{a}_i vektorları rombik sinqoniyaya mənsubdursa, onda $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ vektorları uyğun olaraq $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vektorlarına paralel olacaqdır, kubik sinqoniyada isə bundan əlavə həm də $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = |\vec{b}_3| = \frac{1}{|\vec{a}_i|}$ olacaqdır.

Qeyd etmək lazımdır ki, tərs kristal qəfəs ideyası düz kristal qəfəsinin periodikliyinə malik hər hansı funksiyanın Furye sırasına ayrılması məsələsindən meydana çıxmışdır. Bu cür yanaşma elektronun bərk cisimdə (periodik sahədə) hərəkətinin kvant mexanikası əsasında öyrənilməsi işini asanlaşdırır.

Tərs kristal qəfəs vektorunun iki mühüm xassəsini də qeyd edək:

Teorem 1. $g_1 : g_2 : g_3 = h : k : l$ olarsa, onda $\vec{b}_g = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3$ tərs qəfəs vektoru düz qəfəsin (hkl) müstəvisinə perpendikulyardır. Bunu isbat etmək üçün bazis vektorları uyğun olaraq \vec{a}_i və \vec{b}_i olaraq düz və tərs qəfəsin elementar özəyini quraq. Aydındır ki, burada \vec{b}_i -lərlə \vec{a}_i -lərin miqyas ölçüləri eyni deyil, çünki onlar müxtəlif adlı (ölçülü) kəmiyyətlərdir. b_i -lərin miqyas ölçüsünü biz ixtiyari götürə bilərik. Sadəlik və əyənlik üçün kub və ya romb kristal qəfəs halına baxaq (şəkil 1.20).



Şəkil 1.20

Tutaq ki, (hkl) müstəvisi uyğun kordinat oxlarından $OA = ma_1$, $OB = na_2$, $OC = pa_3$ parçalarını ayırır. Verilmiş şertə görə $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = h : k : l$.

Onda $\vec{BA} = (m\vec{a}_1 - n\vec{a}_2)$ və $\vec{CA} = (m\vec{a}_1 - p\vec{a}_3)$ vektorları (hkl) müstəvisi üzərindədir və həm də bir-birinə paralel deyildir.

İndi tərs qəfəsdə \vec{b}_g vektoruna paralel olan $\vec{b} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ vektorunu götürək və göstərek ki, o, (hkl) müstəvisinə perpendikulyardır. Bunun üçün (\vec{BA}, \vec{b}) və (\vec{CA}, \vec{b}) skalyar hasilələrinin sıfıra bərabər olduğunu isbat etmək kifayətdir. Doğurdan da:

$$((m\vec{a}_1 - n\vec{a}_2), \vec{b}) = ((m\vec{a}_1 - n\vec{a}_2)(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)) = mh - nk = 0$$

çünki şertə görə: $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} = h : k$, $\frac{k}{m} = \frac{h}{n}$, buradan da $nk = mh$

Eləcə də:

$$((m\vec{a}_1 - p\vec{a}_3), \vec{b}) = ((m\vec{a}_1 - p\vec{a}_3)(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)) = mh - pl = 0$$

Bunun da isbatı tələb olunurdu.

Məsələn, kubik sistemdə $\vec{b}_{111} = 1 \cdot \vec{b}_1 + 1 \cdot \vec{b}_2 + 1 \cdot \vec{b}_3$ vektoru (111) müstəvisinə və s. perpendikulyardır. Buradan da görünür ki, düz qəfəsdə bir dəne vektor uyğun gəlir.

Teorem 2. \vec{b}_{hkl} - tərs qəfəs vektorunun uzunluğu düz qəfəsdə uyğun (hkl) paralel müstəvilər ailəsində iki qonşu müstəvi arasındakı məsafənin tərs qiymətinə bərabərdir. Bunu isbat etmək üçün (hkl) müstəvisinə perpendikulyar bir vahid $\vec{n} = \frac{\vec{b}_{hkl}}{b_{hkl}}$ vektorunu seçək. İki qonşu müstəvi arasındakı məsafə d_{hkl} :

$$d_{hkl} = \left(\frac{\vec{a}_1}{h}, \vec{n} \right) = \frac{1}{h} \left(a_1, \frac{\vec{b}_{hkl}}{b_{hkl}} \right) = \frac{1}{hb_{hkl}} (\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_{hkl}) = \frac{1}{hb_{hkl}} (\vec{a}_1, (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)) =$$

$$= \frac{1}{hb_{hkl}} \cdot h = \frac{1}{b_{hkl}}.$$

Deməli: $b_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}}$. Bunu da isbat etmək tələb olunurdu.

İki misala baxaq. Kubik sistemdə (100) müstəviləri arasındakı məsafə:

$$d_{100} = \frac{1}{b_{100}} = \frac{1}{\sqrt{1 \cdot b^2_1 + 0 \cdot b^2_2 + 0 \cdot b^2_3}} = \frac{1}{b_1} = a$$

yəni $b_{100} = \frac{1}{a}$, (111) müstəviləri arasındakı məsafə

$$d_{111} = \frac{1}{b_{111}} = \frac{1}{\sqrt{1 \cdot b^2_1 + 1 \cdot b^2_2 + 0 \cdot b^2_3}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{a^2} + \frac{1}{a^2} + \frac{1}{a^2}}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

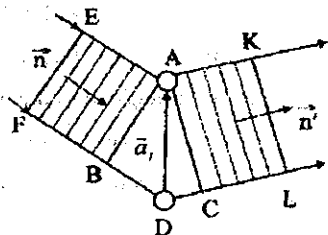
yəni $b_{111} = \frac{\sqrt{3}}{a}$.

§1.8. İnterferensiya şərti və onun tərs qəfəs vektoru ilə əlaqəsi

Kristal qəfəsində rentgen şüalarının səpilməsi zamanı baş verən interferensiya şərtini tərs qəfəs vektoru ilə əlaqələndirmək olar. Tutaq ki, aralarındakı məsafə \vec{a}_1 translyasiya vektoruna bərabər olan hər hansı iki atom üzərinə vahid \vec{n} vektoru istiqamətdə paralel rentgen şüası dəstəsi düşür. Düşən şüa bütün istiqamətlərdə səpiləcək. \vec{n} vahid vektoru istiqamətində səpilən elə iki AK və DL şüalarına baxaq ki, onlar interferensiya nəticəsində bir-birini gücləndirə bilsin (şəkil 1.21). Bu zaman şüaların yollar fərqi $BD + DC$ tam dalğa uzunluğuna bərabər olmalıdır:

$$BD + DC = a, \cos BDA + a, \cos \hat{ADC} = -(\vec{a}_1, \vec{n}) + (\vec{a}_1, \vec{n}') = (\vec{a}_1, (\vec{n}' - \vec{n})) = g, \lambda, \quad (1.8.1)$$

urada λ - dalğa uzunluğu, g_1 - ixtiyari tam ədəddir.



Şəkil 1.21

Üçölçülü fəzada səpilən dalğanın interferensiya edərək bir-birini gücləndirməsi şərti kristalın \vec{a}_1, \vec{a}_2 və \vec{a}_3 translyasiya vektorlarına uyğun olan atomların hamısı üçün eyni z amanda ödənilməlidir. Belə olduqda

(1.8.1) ifadəsinin əvəzinə üç tənlik alırıq:

$$\left. \begin{aligned} (\vec{a}_1, (\vec{n}' - \vec{n})) &= g_1 \lambda, \\ (\vec{a}_2, (\vec{n}' - \vec{n})) &= g_2 \lambda, \\ (\vec{a}_3, (\vec{n}' - \vec{n})) &= g_3 \lambda, \end{aligned} \right\} \quad (1.8.2)$$

Burada $\frac{\vec{n}'}{\lambda} - \frac{\vec{n}}{\lambda}$ ifadəsini \vec{b} ilə işarə etsək, onda (1.8.2) şərti (1.7.8) şərti ilə üst-üstə düşər. Deməli,

$$\frac{\vec{n}'}{\lambda} - \frac{\vec{n}}{\lambda} = \vec{b}_g, \quad (1.8.3)$$

burada

$$\vec{b}_g = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3$$

(1.8.2) ifadəsi və ya ona uyğun olan (1.8.3) ifadəsi Lauenin interferensiya şərti adlanır. Belə şərti ödəyən dalğa vektoru anlayışı daxil etsək:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n} \quad \text{və} \quad |\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (1.8.4)$$

onda (1.8.3) şərti əvəzinə

$$\vec{k}' - \vec{k} = 2\pi \vec{b}_g \quad (1.8.5)$$

alırıq. Aydındır ki, \vec{k} və \vec{k}' vektorları mütləq qiymətcə bir-birinə bərabərdir: $k = k'$, yaxud $\vec{k}^2 = \vec{k}'^2$. Onda (1.8.5) -dən

$$\begin{aligned} \vec{k}^2 &= \vec{k}'^2 = (\vec{k} + 2\pi \vec{b}_g)^2, \\ \vec{k}^2 &= \vec{k}^2 + 4\pi (\vec{b}_g \vec{k}) + 4\pi^2 \vec{b}_g^2, \\ \pi \vec{b}_g^2 + (\vec{b}_g \vec{k}) &= 0 \end{aligned} \quad (1.8.6)$$

Bu ifadə (1.8.2), (1.8.3) və (1.8.4) ifadələrinə ekvivalentdir.

Tərs kristal qəfəsi fəzasında (1.8.5) Laue şərtini təhlil edək. Əyanilik üçün ikiölçümlü (müstəvi) tərs qəfəs götürək (şəkil 1.22). Tərs qəfəsdə düşən şüa istiqamətində $\frac{\vec{k}}{2\pi}$ vektorunu quraq, həm də elə edək ki, bu vektorun sonu tərs qəfəsin hər hansı düyün nöqtəsinə düşsün. Bu vektorun başlanğıc A nöqtəsini mərkəz qəbul etməklə, radiusu $\frac{k}{2\pi} = \frac{1}{\lambda}$ olan bir çevrə (üçölçümlü fəzada sfera) cızmaq (bu, Evald sferasıdır). Bu çevrə (sfera) tərs qəfəsin hər hansı başqa bir B düyün nöqtəsindən keçərsə, onda \vec{AB} vektoru $\frac{\vec{k}'}{2\pi}$ -yə bərabər olacaq. Burada \vec{k}' interferensiyaya uğrayaraq güclənmiş səpilən şüaların dalğa vektorudur. Onda $\vec{OB} = \vec{b}_g$ (1.8.6) şərtini ödəyən tərs qəfəs vektorudur. Beləliklə, tərs qəfəs fəzasında Evald sferası qurmaqla biz qrafiki olaraq qabaqcadan hansı istiqamətlərdə interferensiya maksimumları müşahidə olunacağını müəyyən edə bilərik. (1.8.2), (1.8.3), (1.8.5), (1.8.6) Laue şərtlərinə başqa cür də mənə vermək olar. A nöqtəsindən \vec{b}_g tərs qəfəs vektoruna perpendikulyar olan bir PQ xəttini (üçölçümlü fəzada-müstəvisini) keçirək. Bu, düz qəfəs fəzasında (h l) Miller indeksləri ilə xarakterizə olunan atom müstəvisidir və yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, h : $l = g_1, g_2, g_3$ ədədlərinin ortaq vurulğunu n -lə işarə edək. Onda $b_g = nb_{hkl}$ (hkl) müstəviləri arasındakı məsafə:

$$d_{hkl} = \frac{1}{b_{hkl}} = \frac{n}{b_g}$$

olar. QAB bucağını θ ilə işarə edək. 1.22-ci şəkildən $\triangle ABC$ -dən:

$$CB = AB \cdot \sin \theta,$$

yaxud

$$\frac{b_g}{2} = \frac{k}{2\pi} \cdot \sin \theta, \quad b_g = \frac{2}{\lambda} \cdot \sin \theta$$

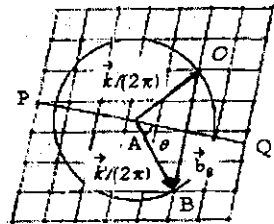
$$\frac{n}{d_{hkl}} = \frac{2}{\lambda} \cdot \sin \theta,$$

nəhayət:

$$2d_{hkl} \cdot \sin \theta = n\lambda. \quad (1.8.7)$$

Bu səpilən dalğalar üçün Vulf-Breqq

şərtidir. $\frac{\vec{k}}{2\pi}$ şüasının (hkl) müstəvisindən



Şəkil 1.22

(1.8.7) şərtini ödəyən bucaq altında güzgü əksi kimi baxa bilərik. Elektronun da hər hansı bir elementar zərrəcik kimi dalğa təbiətinə malik olduğunu nəzərə alsaq, onda asanlıqla görmək olar ki, bütün yuxarıda şərh etdiklərimiz elektron dalğaları üçün də doğru olacaqdır.

§1.9. Yarımkəçiricilərin keçiriciliyi haqqında model təsəvvürlər. Deşiklər haqqında anlayış

Hər hansı maddənin kristal qəfəsi atomların qarşılıqlı təsiri əsasında yaranır və bu qarşılıqlı təsirin xarakteri kristalı təşkil edən atomların elektron təbəqələrinin quruluşu ilə müəyyən olunur. Bu halda əsas rolu mübadilə effekti oynayır ki, bunun nəticəsində kristal qəfəs formalaşarkən qarşılıqlı təsire girən atomlar bir-biri ilə elektron mübadiləsi edərək elektron verə və ya ala bilir, bu da onlar arasında cazibə qüvvələrinin yaranmasına səbəb olur. Kristal qəfəs eyni element atomlarından ibarət olarsa, bu əlaqələr eyni atomlar arasında yarandığından homopolyar əlaqələr adlanır. Homopolyar əlaqələrdə ilk növbədə valent elektronları iştirak etdiyindən ona kovalent rabitə də deyirlər. Ən güclü kovalent əlaqə o zaman yaranır ki, atomlar bir-birinin əksinə yönəlmiş spinlərə malik elektron cütləri ilə rabitəyə girmiş olsunlar. Buradan görünür ki, kovalent rabitə doyma xassəsinə malik olmalıdır-üçüncü elektronun iştirakı əlaqəni gücləndirə bilməz, çünki bu zaman iki elektronun spini paralel yönəlməlidir ki, bu da itələmə qüvvələrinin meydana çıxması ilə nəticələnər.

Kovalent və ya elektron cütləri rabitəsinin bu xassəsi Pauli prinsipindən alınır və verilmiş hal üçün bu belə ifadə oluna bilər: eyni spin proyeksiyalarına malik iki elektron atomlar arasında fəzanın eyni bir oblastında yerləşə bilməzlər. Kovalent əlaqəli maddələrə misal olaraq alman, silisiumu, germaniumu və s. göstərmək olar.

Kristal qəfəs müxtəlif element atomlarının qarşılıqlı təsiri nəticəsində formalaşarsa, elektron buludunun maksimal sıxlığına malik oblast valent zonasında daha çox elektrona malk olan atoma doğru sürüşür, nəticədə bu atom mənfi yüklü, digər atom isə müsbət yüklü iona çevrilir və bunlar arasında Kulon qarşılıqlı təsir qüvvəsi əsas rol oynayır, belə rabitə müvafiq olaraq ion rabitəsi adlanır. İon rabitəsi qələvi-hologenid duzlarda (NaCl, KCl, LiF və s.) özünü daha kəskin biruzə verir. İon rabitəsinə kovalent rabitənin limit halı kimi də baxmaq olar. Ümumiyyətlə, heç vaxt təkə bir rabitədən danışmaq olmaz, yalnız hər hansı bir rabitənin üstünlük təşkil etdiyini söyləmək olar. Ona görə də, adədetən, məsələn, ikinci qrup elementlərinin sulfidləri və ya oksidlərindən danışarkən, rabitənin neçə faiz ion, neçə faiz isə başqa bir tipə aid olmasını söyləmək olar. Mübadilə

qarşılıqlı təsirinə başqa limit halı metallik rabitədə reallaşır. Metalların kristal qəfəslərində öz atomları ilə çox zəif əlaqədə olan valent elektronlarının bir qismi konkret bir atoma mənsub olmayıb, bütövlükdə kristal qəfəse aid olub, kollektivləşir. Özünü bir növ ideal qaz kimi aparən kristal qəfəsdəki belə elektron qazı metallik rabitə yaradır və tərifindən görüldüyü kimi, əsasən, metallara xas olur. Heç bir halda bu üç rabitə arasında kəskin sərhəd ola bilməz. Üzvi kristallarda Van-der-Vaals qarşılıqlı təsiri nəticəsində yaranan daha zəif rabitə müşahidə olunur ki, bunu da molekulyar rabitə adlandırırlar. Belə kristallarda qəfəs daxilində elektron buludunun sıxlığı müxtəlif hissələrdə fluktuasiyalar nəticəsində, kiçik də olsa belə, hər an dəyişə bilər, bu isə həmin hissədə dipol momentinin yaranmasına səbəb olur. Anı mövcud olan belə dipol momentlərinin qarşılıqlı təsiri kristalın bütövlükdə dayanaqlığını təmin edir.

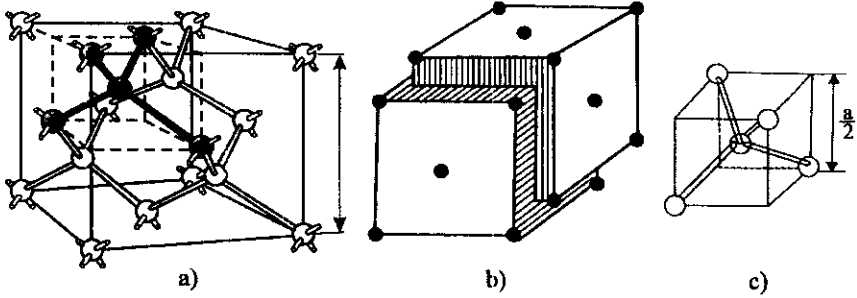
Beləliklə, real kristallarda baxdığımız bütün rabitə növlərinin hamısı eyni zamanda müxtəlif dərəcədə özünü biruzə verə bilər, amma həmişə onlardan biri daha üstün rol oynadığından, kristalın xassələri də əsasən onunla müəyyənləşir. Bizim əsas tədqiqat obyektlərimiz olan yarımkeçirici xassələrin formalaşmasında həlledici rolü kovalent rabitə oynayır.

Yarımkeçiricilərin elektrik keçiriciliklərin silisium misalında təhlil edək. İlkin və ən ətraflı tədqiq olunmuş geniş tətbiq sahəsinə malik olan germanium və silisium əsasən kovalent rabitəli bəsit yarımkeçiricilər olub, almaz tipli kristal quruluşuna malikdirlər (şəkil 1.23,a). Hər bir kristal quruluş götürülmüş atomdan bərabər məsafələrdə (d) yerləşən ən yaxın qonşu atomların sayı ilə xarakterizə olunur. Bu kəmiyyətə koordinasiya ədədi deyilir və z ilə işarə olunur. Məsələn, sadə kub kristal üçün $z = 6$,

$$d = a, \text{ həcme mərkəzləşmiş kub kristal üçün } z = 8, d = \frac{\sqrt{3}}{2}a.$$

Almaz kristal quruluşunun elementar qəfəsini diaqonal boyunca onun dördüdə biri qədər bir-birinə nəzərən sürüşmüş iki səthə mərkəzləşmiş Brave kub qəfəsi ilə təsvir etmək olar (şəkil 1.23,b). Bu cür qəfəsdə hər bir atomun dörd ən yaxın qonşusu vardır ($z=4$). Şəkil 1.23, a-dan görüldüyü kimi, kub kristal qəfəsdə hər elementar özəyə $8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 = 8$ atom düşür, qeyd edək ki, qəfəsdə elementar özəyi mərkəzində və təpə nöqtələrinin dördündə bir atom olan kub (şəkil 1.23,c) kimi də göstərmək olar, özü də kubun mərkəzindəki atom, təpə nöqtələrindəki dörd atomla kovalent rabitədə olur. Belə elementar özəyin hər birinə iki atom düşür. Şəkil 1.23,c-dən qonşu rabitələr arasındakı bucağın $109^{\circ}28'$ olduğunu müəyyən etmək olar. Bu şəkildə göstərilən elementar qəfəsin mərkəzində

bir elementin atomu (məsələn, ZnS birləşməsində Zn atomu), təpə nöqtələrində isə digər element(məsələn, S) atomu yerləşmişə, onda belə quruluşa sink-sulfid quruluşu deyilir. $A^{III}B^V$ tipli yarımkəçirici birləşmələr məhz bu quruluş üzrə kristallaşırlar.

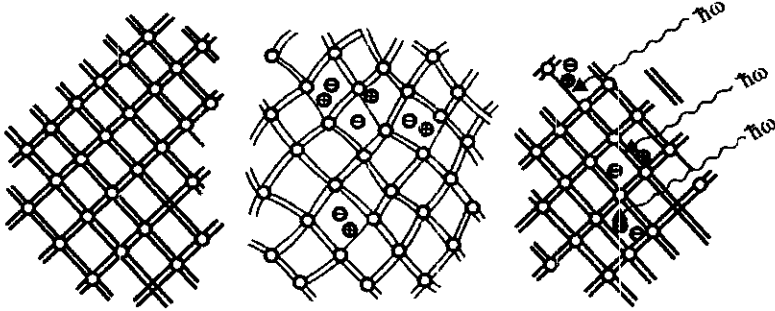


Şəkil 1.23. Almazın kristal qəfəsi

Hər bir silisium atomunun 14 elektronu var və onlar elektron təbəqələri üzrə $(1s^2)(2s^2)(2p^6)(3s^2)3p^2$ kimi paylanmışdır. Göründüyü kimi tam dolmayan üçüncü təbəqədə 4 valent elektronu var. Qeyd etdiyimiz kimi silisium almaz tip kristal quruluşuna malikdir və belə qəfəsdə tetraedrin mərkəzində yerləşmiş hər bir atom özünə ən yaxın olan dörd digər atomla elektron cütləri ilə əlaqədardır. Beləliklə, hər bir silisium atomunun dörd valent elektronu tetraedrik kovalent rabitənin yaranmasında iştirak edir. Aydın ki, belə kristal, sərbəst yükdaşıyıcılar olmadığından, elektrik cərəyanını keçirə bilməz. Kristalın elektrik keçiriciliyinə malik olması üçün hər hansı bir vasitə ilə (ışq kvantı, istilik enerjisi, şüalandırma və .s) kovalent rabitədə iştirak edən elektronların bir hissəsini qoparıb, kristal qəfəs daxilində sərbəst hala gətirmək lazımdır. Enerji diaqramında ən sadə şəkildə rabitədə iştirak edən elektronun enerjisini E_V , rabitədən qoparılmış elektronun enerjisini isə E_S ilə işarə edək. Bu diaqramdan göründüyü kimi, rabitənin qırılmasına sərf olunan enerji $E_S - E_V$ olar. Müxtəlif maddələr üçün müxtəlif olan bu enerji silisium üçün 1,08eV-a bərabərdir. Qeyd edək ki, bir elektronun rabitədən qoparılması bir ədəd tamamlanmamış rabitə yaranmasına səbəb olur.

Şəkil 1.24-də ideal kristal diaqramı (a), kristal qəfəsin istilik rəqsləri hesabına (b) və müvafiq enerjili fotonun udulması nəticəsində (c) sərbəst elektronun yaranması təsvir olunmuşdur. İştirak etdiyi kovalent rabitədən qoparılmış elektron kristal üzrə xaotik hərəkət edir. Əgər elektron qoparıldığı əlaqə yerinə yaxınlaşarsa, öz enerjisini qəfəyə verib və ya foton şəklində şüalandırıb, atomla yenidən qovuşa bilər. Bu proses

rekombinasiya adlanır və o, bağlı elektronun əlaqədən qopması-generasiya prosesinin əksidir. Qeyd edək ki, generasiya prosesində bir sərbəst elektron birbaşa yarandığı halda, rekombinasiya prosesində hər iki yükdaşıyıcı yox olur. Təmiz yarımqeçiricidə sərbəst elektronların və tamamlanmamış əlaqənin sayı eyni olur və bu səbəbdən kristalın bütövlükdə elektroneytrallığı pozulmur.



Şəkil 1.24. Qəfəsin istilik rəqsləri və yarımqeçiricilərin şüalanması nəticəsində keçiriciliyin yaranması

Belə kristala \vec{E} xarici elektrik sahəsi tətbiq etsək, bu sahə tərəfindən hər bir sərbəst elektrona $e_n \vec{E}$ qüvvəsi təsir etdiyindən, onlar sahənin əks istiqamətində dreyf sürəti qazanaraq sıxlığı

$$\vec{j}_n = e_n \mu_n n \vec{E} = \sigma_n \vec{E} \quad (1.9.1)$$

kimi müəyyən olunan elektrik cərəyanı yaradırlar. Burada n-elektronların konsentrasiyası, μ_n -onların yürüklüyüdür. Metallarda elektronların konsentrasiyası işıqlanma, istilik enerjisi, şüalanma və s. kimi kənar amillərdən asılı olmadığı halda, yarımqeçiricilərdə bu amillər əsas rol oynadığından, onların elektrik keçiriciliyi geniş intervalda dəyişə bilər. Bununla bərabər yarımqeçiricilərdə keçiriciliyin digər mexanizmləri də mövcuddur. Həqiqətən də elektronun hərəkəti nəticəsində qırılmış rabitə yeri bir atomdan digər atoma doğru yerini dəyişə bilər və bu hərəkət elektronun xaotik hərəkətinə oxşar baş verir. Xarici \vec{E} elektrik sahəsi tətbiq etdikdə elektronların sahənin əksinə doğru hərəkəti (dreyf hərəkəti) üstünlük təşkil edir və onlar öz hərəkətləri istiqamətində boş rabitə yerlərini tuta bilərlər. İdeal kritallarda bütün rabitələr tamamlanmışdırsa, Pauli prinsipinə görə əlaqəli elektronların hərəkəti mümkünsüz olardı. Qırılmış rabitə yerlərinin mövcudluğu elektronların sahənin əksinə doğru hərəkətinə imkan yaradır, bununla da valent elektronlar toplusu da keçiricilikdə iştirak etmək imkanı qazanır. Bu zaman əlaqəli elektronların yürüklüyü vakansiya yerlərinin sayından asılı olmalıdır (kristalda qırılmış

rabilələrin sayı çox olduqca, onların qonşu əlaqəli elektronlarla tutulma ehtimalları da yüksəkdir). Əgər əlaqəli elektronların sayını N , onların yürüklüyünü μ_N -lə işarə etsək, onlara müvafiq cərəyan sıxlığı:

$$\vec{j}_N = e_n \mu_N N \vec{E} \quad (1.9.2)$$

olar. Beləliklə, yarımkəçiricilərdə iki növ yük daşıyıcılar-sərbəst elektronlar və əlaqəli elektronlar iştirak edir. Məhz bu səbəbdən yekun cərəyan sıxlığı

$$\vec{j} = \vec{j}_n + \vec{j}_N = (e_n \mu_n n + e_n \mu_n N) \vec{E} \quad (1.9.3)$$

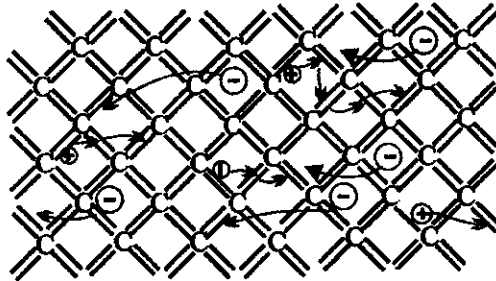
cəmi ilə ifadə olunur. Amma valent elektronlar toplusunun belə hərəkətindənə, boş əlaqələrin hərəkətinə baxmaq daha rahatdır. Əlaqəli elektronların sahənin əksi istiqamətindəki hərəkəti, qırılmış rabitə yerlərinin sahə istiqamətində hərəkətini doğurur ki, bu da yükü elektronların yükünə bərabər e^+ -müsbət yükün sahə üzrə hərəkət ilə eynigüclüdür (Şəkil 1.25). Bu halda nəzərə almaq lazımdır ki, **müsbət yük ona təsir edən $e^+ \vec{E}$ qüvvəsinin təsiri ilə deyil (qüvvə boş yerə təsir edə bilməz!), elektronun sahənin əksinə hərəkəti nəticəsində sahə istiqamətində yerini dəyişir.** Qırılmış əlaqələrin (vakansiyaların) sayını p , onların yürüklüyünü μ_p ilə işarə etsək, onlara uyğun cərəyan sıxlığı üçün

$$\vec{j}_N = e_n \mu_n N \vec{E} = e_p \mu_p p \vec{E} = \vec{j} \quad (1.9.4)$$

ifadəsini yaza bilərik.

Sonralar Brillyüen zonaları üsulunda görecəyimiz kimi, μ_p yürüklüyü p-dən asılı olmamalıdır.

Deməli, bağlı elektronların sahənin əks istiqamətindəki hərəkətini sahə istiqamətində hərəkət edən elementar müsbət yüklü kvazi-zorrəciyin hərəkəti ilə əvəz etmək olar.



Şəkil 1.25. Elektrik sahəsində elektron və vakansiyanın hərəkəti

Bu kvazi-zərrəciyin **deşik** adlandırılması qəbul edilmişdir. Deşiklərin hesabına yaranan keçiricilik **deşik keçiriliyi** adlanır. P-kəmiyyəti deşiklərin konsentrasiyası, μ_p -deşiklərin yürüklüyü, $e=e^+$ isə deşiyin yükü adlanır. Kristal qəfəsdə hər hansı xarici amil hesabına generasiya prosesində yaranan sərbəst elektronlar və deşiklər **məxsusi yükdaşıyıcılar**, onların yaratdığı keçiricilik isə məxsusi keçirilik adlanır. **Keçiricilikləri məxsusi yükdaşıyıcılar hesabına yaranan yarımkeçiricilərə məxsusi yarımkeçiricilər deyilir.** Aydınır ki, məxsusi yarımkeçiricilərdə deşik və elektronların konsentrasiyaları eynidir: $n=p$, onda yekun cərəyan sıxlığı

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = (e_n \mu_n n + e_p \mu_p p) \vec{E} = (\sigma_n + \sigma_p) \vec{E} \quad (1.9.5)$$

kimi ifadə oluna bilər. Yürüklüyü skalyar kəmiyyət qəbul edərək, elektron və deşiklər üçün onların nisbətini $b = |\mu_n|/|\mu_p|$ ilə işarə etsək, məxsusi yarımkeçiricilərin elektrik keçiricilikləri üçün

$$\sigma = e_n \mu_n n + e_p \mu_p p = e_p p \mu_p \left(1 + \frac{\mu_n}{\mu_p} \right) = e_p p \mu_p (1 + b) \quad (1.9.6)$$

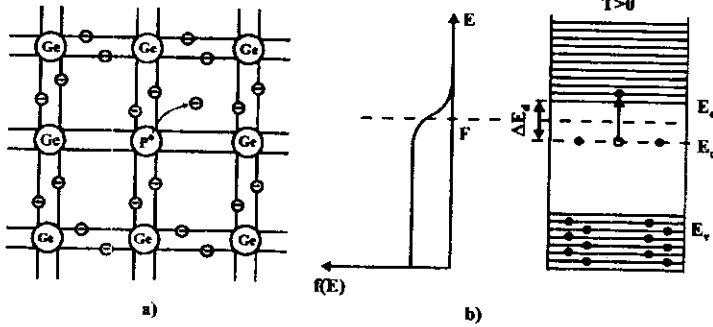
alırıq.

§1.10. Yarımkeçiricilərdə aşqar keçiricilik

Məxsusi yarımkeçiricilərin keçiriciliyindən danışarkən qeyd etdik ki, onlarda elektron və deşiklərin konsentrasiyası eynidir. Amma olduqca müxtəlif yarımkeçirici maddələrdə bu şərt ödənilmir və bu əksər yarımkeçirici cihazların iş prinsiplərinin əsasında durur. Elektron və deşiklərin konsentrasiyaları arasındakı bu fərq yarımkeçirici maddələrə kənar atomlar-aşqarlar daxil etməklə yadılır. **Aşqar daxil etməklə yaranan keçiricilik aşqar keçiriliyi** adlanır. Bu keçiriciliyin mahiyyətini başa düşmək üçün IV qrup elementi germaniuma qonşu V və III qrup element atomlarının aşqar kimi daxil edilməsi hallarına baxaq.

Fərz edək ki, germanium kristal qəfəsində atomların birini V qrup elementi fosfor atomu ilə əvəz etmişik (şəkil 1.26). Fosforun elektron təbəqələrinin düzülüşündən görüldüyü kimi ($P^{15}(1s^2)(2s^2)(2p^6)(3s^2)(3p^3)$) onun beş valent elektronlarının ikisi 3s, üçü isə 3p səviyyəsindədir. Bunlardan dördü kovalent rabitədə iştirak edir, beşincisi isə rabitələrdə boş yer olmadığından yalnız fosfor atomunun özyinə mənsub olub, onun ətrafındakı orbitdə qalır. Bu elektrona digər germanium atomları təsir edir və onun öz atomu ilə əlaqəsi hesablamalardan alındığı kimi ϵ^2 dəfə kiçilir (ϵ -nisbi dielektrik nüfuzluğu olub, germanium üçün $\epsilon \approx 16$ -dır). Bu isə o deməkdir ki, fosforun bu beşinci valent elektronunu sərbəstləşdirmək üçün ona onlarla dəfə az enerji sərf etmək lazım gəlir.

Məhz bu səbəbdən aşqar atomları asanlıqla ionlaşa bilər və baxılan halda dörd valentli germanium qəfəsinə daxil edilmiş beş valentli fosfor atomlarının asanlıqla ionlaşa bilməsi nəticəsində çox böyük sayıda sərbəst elektronlar yaranır. Elektron vərə bilən belə aşqarlar **donor tipli aşqarlar** adlanırlar. Elektronlarını itirən fosfor atomları müsbət yüklü ionlara çevrilirlər. Amma bu ionlar keçiricilikdə iştirak etmir və onların rolu əsasən kristalı sərbəst elektronlarla təchiz etməklə məhdudlaşır.



Şəkil 1.26. Fosfor aşqarlı germanium kristalında sərbəst elektronların emələ gəlməsi modeli. a- müstəvi təsvirdə; b- energetik zona diaqramında

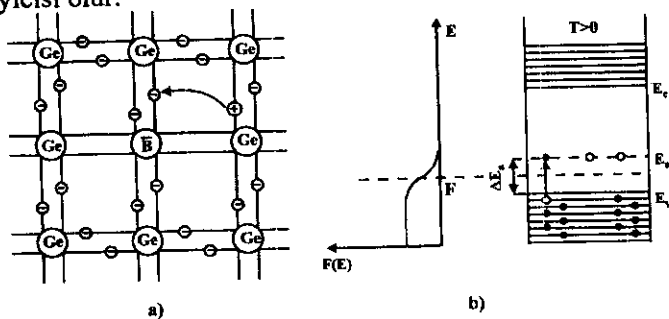
Aşqar atomlarının ionlaşması ilə yanaşı əsas maddə atomlarının da qismən ionlaşması baş verir, amma onların konsentrasiyası və deməli keçiriciliyə verdikləri pay, aşqar atomlarına nəzərən xeyli kiçik olduğundan, sərbəst elektronların ümumi sayı deşiklərin sayından çox-çox böyük olur. Belə kristaldan cərəyan keçərkən əsas yük elektronlarla daşındığından, onlara əsas yükdaşıyıcılar, deşiklərə isə qeyri-əsas yükdaşıyıcılar deyilir. Belə yarımkeçirici **elektron** və ya **n-tip yarımkeçirici** adlanır. Elektron tip yarımkeçiricinin elektrik keçiriciliyi, $p \ll n$ və $\sigma_p \ll \sigma_n$ olduğundan,

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p \approx \sigma_n = e_n \mu_n n \quad (1.10.1)$$

kimi ifadə oluna bilər.

İndi başqa hala baxaq. Fərz edək ki, baxdığımız germanium kristalına hər hansı üç valentli, məsələn, bor atomu daxil etmişik. Bor üç valent elektronuna malik olduğundan tetraedrik əhatədə onun germanium atomu ilə bir rabitəsi dolmamış qalacaq (şəkil 1.27). Bu rabitənin tamamlanması üçün qonşu germanium atomundan bir valent elektronu həmin boş rabitə yerinə keçməlidir və nəticədə həmin germanium atomu müsbət yüklənmiş iona çevrilir. Elektronun rabitələr arasındakı belə yerdəyişməsinə, onu sərbəstləşdirməyə sərf olunan enerjiden onlarla dəfə az enerjii

sərf edilir. Ona görə də əsas element atomlarının, elektronlarındeşiklər əmələ gəlməsi ilə müşahidə olunan əsas element atomlarından aşqar atomlarına (baxılan halda germanium atomlarından bor atomlarına) keçidi ilə ionlaşmaları sərbəst elektronların yaranması ilə nəticələnən ionlaşmasına nəzərən daha çox sayda baş verir. Bu zaman mənfi yük aşqar atomlarında lokallaşır və keçiricilikdə iştirak etmirlər. İki əsas maddə atomu arasında tamamlanmamış əlaqə (əlaqələrdəki deşik) isə müsbət yük daşıyıcısı olur.



Şəkil 1.27. Bor aşqarlı germanium kristalında sərbəstdeşiklərin əmələ gəlməsi modeli. a- müstəvi təsvirdə; b- energetik zona diaqramında

Təhlil etdiyimiz hala uyğun, elektron qəbul edən aşqar **akseptor tipli aşqar** adlanır (baxılan halda germaniuma daxil edilmiş bor atomları). Belə kristallardadeşiklərin sayı, qeyd etdiyimiz kimi, sərbəst elektronların sayından çox-çox böyük olur və onlar keçiricilikdə əsas rol oynayırlar. Ona görə belə yarımkəçiricilər **deşik keçiriciliyinə malik olurlar**. P-tip yarımkəçiricilərdə əsas yükdaşıyıcılardeşiklər olduğundan $n \ll p$ və $\sigma_n \ll \sigma_p$ şərti ödənilir və onda keçiriciliyi

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p \approx \sigma_p = e_p \mu_p p \quad (1.10.2)$$

kimi ifadə etmək olar.

Beləliklə, adətən aşqar atomunun valentliyi əsas element atomun valentliyindən böyük olduqda, elektron (n-tip) keçiricilik, kiçik olduqda isədeşik keçiriciliyi (p-tip) müşahidə olunur. Amma bu qayda heç də həmişə ödənilmir.

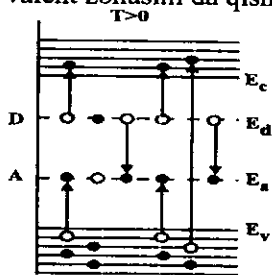
Aşqarlı yarımkəçiricidə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası məxsusi yarımkəçiricidəkindən çox olduğundan, hər hansı tip aşqara malik maddənin xüsusi müqaviməti təmizinkindən azdır. Başqa sözlə, yarımkəçirici maddəyə aşqar vurulduqda (legirə etdikdə) onun elektrik müqaviməti azalır.

Əgər maddədə eyni zamanda hər iki tip aşqar olarsa, qarşılıqlı

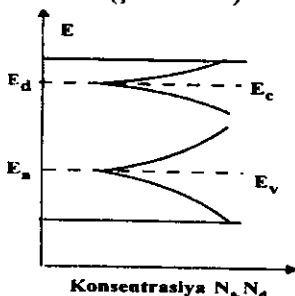
kompensasiya baş verir. Əgər akseptor və donor tipli aşqar atomlarının konsentrasiyaları bərabər olarsa, onda tam kompensasiya baş verir və maddə özünü məxsusi yarımqeçirici kimi aparır. Belə maddələr kompensə olunmuş yarımqeçiricilər adlanır və böyük müqavimətə malik olurlar.

Keçiriciliyin növü daxil edilən aşqardan asılı olan yarımqeçiricilər **amfoter yarımqeçiricilər** adlanır.

Əgər aşqar atomlarının konsentrasiyası kiçikdirsə, onlar bir-birindən uzaqda yerləşirlər və demək olar ki, bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olurlar, bu zaman onlar qadağan zonasında lokal aşqar səviyyələri törədirlər. Lakin aşqarların konsentrasiyası artdıqca, onlar arasındakı qarşılıqlı təsiri nəzərə almaq lazım gəlir. Bu halda qonşu aşqar atomlarının dalğa funksiyaları bir-birini örtməyə, aşqar səviyyələri parçalanmağa başlayır və aşqar səviyyələr zonası yaranır. Aşqar atomlarının konsentrasiyası kifayət qədər böyük olduqda aşqar səviyyələr zonası genişlənərək sərbəst və ya valent zonasını da qismən örtə bilər (şəkil 1.29).



Şəkil 1.28. Donor və akseptor aşqarlı yarımqeçiricidə sərbəst yükdaşıyıcıların yaranma modeli



Şəkil 1.29. Aşqar konsentrasiyalarının artması ilə yarımqeçiricilərdə donor və akseptor zonalarının yaranması və onların sərbəst və valent zonaları ilə birləşməsi

Bundan əlavə yarımqeçiricilərdə aşqarların miqdarı artdıqca aşqar mərkəzlərin ionlaşma enerjiləri də kiçilir və aşqar konsentrasiyasının kifayət qədər böyük qiymətlərində uyğun səviyyələrin bir-birini örtməsi zamanı bu ionlaşma enerjisi sıfıra çata bilər.

Germanium və silisiumda V qrup elementlərindən ibarət donor aşqarları halında bu vəziyyət uyğun olaraq konsentrasiyanın $3 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ və 10^{24} m^{-3} qiymətlərində baş verir.

II FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRİN ZONA NƏZƏRİYYƏSİNİN ƏSASLARI

§2.1. Kristal üçün Şredinger tənliyi

İstənilən bərk cisim çox böyük sayda atom nüvələri və elektronların məcmusundan ibarətdir. Belə zərrəciklər sisteminin enerji spektri və stasionar hallarını təyin etmək üçün Şredinger tənliyini həll etmək lazım gəlir:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.1.1)$$

burada \hat{H} kristalın hamiltonianı, Ψ - onun məxsusi funksiyası, E - onun məxsusi qiyməti və ya kristalın enerjisidir. Kristalın dalğa funksiyası onu təşkil edən bütün zərrəciklərin koordinatlarından asılıdır:

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots; \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) = \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_\alpha) \quad (2.1.2)$$

burada $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots$, və ya \vec{r}_i elektronların, $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots$ və ya \vec{R}_α isə atom nüvələrinin koordinatlarıdır.

Hamilton operatoru aşağıdakı enerji növlərini özündə birləşdirir:

1) elektronların kinetik enerjisi \hat{T}_e :

$$\hat{T}_e = \sum_i \hat{T}_i = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \quad (2.1.3)$$

burada $\Delta_i = \nabla_i^2 - i - ci$ elektron üçün Laplas operatorudur:

$$\Delta_i = \nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \quad (2.1.4)$$

2) nüvələrin kinetik enerjisi \hat{T}_z :

$$\hat{T}_z = \sum_\alpha \hat{T}_\alpha = \sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha \right) \quad (2.1.5)$$

burada M_α - nüvələrin kütlələridir.

$$\Delta_\alpha = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.1.6)$$

3) elektronların cüt-cüt qarşılıqlı təsir enerjiləri \hat{U}_e :

$$\hat{U}_e = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} e^2 / (4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{U}_{ij} \quad (2.1.7)$$

4) nüvələrin cüt-cüt qarşılıqlı təsir enerjisi \hat{U}_z :

$$\hat{U}_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 |\bar{R}_\alpha - \bar{R}_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{U}_{\alpha\beta} \quad (2.1.8)$$

burada $Z_\alpha e$ və $Z_\beta e - \alpha$ və β - nüvələrinin yükləridir.

5) elektronların nüvələrlə qarşılıqlı təsir enerjiləri $\hat{U}_{e\alpha}$:

$$\hat{U}_{e\alpha} = -\sum_{i,\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 |\bar{r}_i - \bar{R}_\alpha|} = \sum_{i,\alpha} \hat{U}_{i\alpha} \quad (2.1.9)$$

6) bütün zərrəciklərin xarici sahədəki enerjiləri \hat{V} :

$$\hat{V} = \hat{V}(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots; \bar{R}_1, \bar{R}_2, \dots) \quad (2.1.10)$$

Belə halda kristalın hamiltonlarını xarici sahədə aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_z + \bar{U}_e + \bar{U}_z + \bar{U}_{e\alpha} + \hat{V} \quad (2.1.11)$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

(2.1.11) Şredinger tənliyinə $3(Z+1)N$ sayda dəyişən daxildir, burada N – kristaldakı atomların sayıdır. (2.1.11) tənliyini həll etməklə və kristal haqqında bütün məlumatları: enerjinin mümkün qiymətlərini, nüvənin konfigurasiyası və elektronların fəza paylanması əldə etmək olar. Kristalın 1 sm^3 həcmində 10^{23} –ə yaxın atom olduğundan (2.1.11) tənliyi çox böyük sayda dəyişənlərə malik olur və ona görə də onun dəqiq həlli praktiki mümkün deyil. Ona görə də bərk cisim nəzəriyyəsinin əsas məsələsi təqribi həll üsullarının tətbiqi ilə kristal üçün Şredinger tənliyini həll edib lazımı məlumatları əldə etməkdir. Bu üsullardan biri kristallik qəfəsin periodik sahəsində hərəkət edən elektron üçün mümkün yaxınlaşmadır. Belə yaxınlaşma kristalın zona energetik diaqramına gətirib çıxarır.

Şredinger tənliyini həll etmək üçün qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklər sistemini qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminə gətirmək lazımdır. Bu zaman zərrəciklər sistemi üçün Şredinger tənliyi hər biri ayrı-ayrılıqda bir zərrəciyi təsvir edən tənliklər sistemine parçalanır. Həqiqətən sistemin ümumi hamiltonianı hamiltonianların cəmi kimi göstərilə bilər:

$$\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k, \quad (2.1.12)$$

burada \hat{H}_k yalnız k -cı zərrəciyin koordinatından asılıdır.

$$\hat{H}_k = -\frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_k + \hat{U}_k(\bar{r}_k) \quad (2.1.13)$$

Sistemin dalğa funksiyası ayrı-ayrı zərrəciklərin dalğa funksiyalarının hasili, enerjisi isə enerjiləri cəmi kimi göstərilə bilər:

$$\Psi = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots) = \Psi_1(\bar{r}_1) \Psi_2(\bar{r}_2) \dots \quad (2.1.14)$$

və

$$E = \sum_k E_k, \quad (2.1.15)$$

burada E_k və Ψ_k öz aralarında

$$\hat{H}_k \Psi_k(\bar{r}_k) = E_k \Psi_k(\bar{r}_k) \quad (2.1.16)$$

kimi münasibətdədirlər ki, bunun doğruluğu da (2.1.14)-ü Sredinger tənliyində yerinə qoymaqla (2.1.16)-nı (2.1.15)-də nəzərə alsaq asanlıqla isbat olunur.

Qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklər sisteminin (2.1.11) tənliyindən qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəcikləri təsvir edən tənliklər sisteminə keçid müəyyən təqribi yaxınlaşmalar çərçivəsində mümkündür.

Fərz edəcəyik ki, xarici sahələr yoxdur:

$$V(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots; \bar{R}_1, \bar{R}_2, \dots) = 0 \quad (2.1.17)$$

Sredinger tənliyinin sadələşməsinə keçməzdən əvvəl kristalın enerjisinin ifadəsini

$$E = \int \Psi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots; \bar{R}_1, \bar{R}_2, \dots) \hat{H} \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots; \bar{R}_1, \bar{R}_2, \dots) d\tau \quad (2.1.18)$$

kimi yazaq. Burada inteqrallama bütün zərrəciklərin koordinatları üzrə aparılır.

$$d\tau = dx_1 dy_1 dz_1 \dots dX_1 dY_1 dZ_1 \dots = d\tau_e d\tau_z \quad (2.1.19)$$

$\Psi(\bar{r}_1, \dots; \bar{R}_1, \dots)$ dalğa funksiyası kristalın istənilən zərrəciyinin hərəkətini müəyyən etməyə imkan verir. Onun köməyi ilə sistemin halının enerjisinin minimumluq şərtindən nəzəri olaraq maddenin kristallik quruluşu və onun mümkün modifikasiyalarını təyin etmək olar.

§ 2.2. Adiyabatik yaxınlaşma. Born-Oppenheymer yaxınlaşması

Sredinger tənliyinin sadələşdirilməsi üsullarından biri *adiyabatik yaxınlaşma* və ya *Born-Oppenheymer yaxınlaşmasıdır*. Bunun mahiyyəti elektron və nüvələrin hərəkətləri arasındakı ciddi fərqdədir, belə ki, elektronlar nüvələrə nəzərən çox böyük sürətlə hərəkət etdiklərindən, istənilən anda nüvənin elektrona nəzərən sükunətdə olduğunu qəbul etmək olar. Bu üsulun fiziki mənası ondadır ki, elektron və nüvələrin hərəkətlərini bir-birindən asılı olmadan xarakterizə etmək olar. Onda kristala sürətli elektronlardan və praktiki olaraq sükunətdə olan nüvələrdən ibarət iki alt sistemdən təşkil olunmuş quruluş kimi baxmaq olar. Beləliklə, nüvə və elektronlar sisteminə dair məsələni bu nüvələrdən təşkil olunmuş qəfəsdə

hərəkət edən elektronların halını xarakterizə edən sadə məsələyə gətirmək olar.

Nüvələrin sükunətdə olması şərtindən $\bar{R}_\alpha = \bar{R}_\alpha^0$, nüvələrin kintik enerjilərinin sıfıra bərabər, nüvələrin qarşılıqlı təsirinə potensial enerjisi U_z isə sabit olması səbəbindən koordinat başlanğıcını uyğun qaydada seçməklə bu kəmiyyəti də sıfıra bərabər etmək olar. Onda $\hat{T}_z = 0$ və $\bar{U}_z = 0$ şərtindən hamiltonianın ifadəsini

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \bar{U}_e + \bar{U}_{ez} \quad (2.2.1)$$

kimi yazmaq olar və bu artıq elektronların hamiltonianı adlanır. Elektronların dalğa funksiyasını Ψ_e ilə işarə edək. Onda $\Psi_e(\bar{r}_i; \bar{R}_\alpha^0)$ nüvələrin koordinatlarının istənilən qiymətlərində elektronların kordinatları üzrə inteqrallamada vahidə normalaşma şərti ödənilməlidir:

$$\int \Psi_e^*(\bar{r}_i, \dots; \bar{R}_1^0, \dots) \Psi_e(\bar{r}_i, \dots; \bar{R}_1^0, \dots) d\tau_e \quad (2.2.2)$$

Bu şərtlər daxilində Şredinger tənliyi aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (2.2.3)$$

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\bar{r}_i - \bar{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i, \alpha} \frac{Ze^2}{|\bar{r}_i - \bar{R}_\alpha^0|} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e$$

\bar{R}_α^0 bu tənliyə dəyişən kimi deyil, son halda dalğa funksiyasına və kristalın enerjisinin qiymətinə təsir edən parametrlər kimi daxil olur:

$$E_e = \int \Psi_e^* \hat{H}_e \Psi_e d\tau_e = E_e(\bar{R}_1^0, \bar{R}_2^0, \dots) \quad (2.2.4)$$

E_e - sükunətdə olan nüvələrin sahəsində hərəkət edən elektronların enerjisidir.

Qeyd etmək lazımdır ki, sükunətdə olan nüvələr haqqında təsəvvür həddindən artıq kobuddur. Nüvələrin hərəkətdə olduqlarını qəbul etmək olar və bu hərəkəti $\Phi_z(\bar{R}_1, \dots)$ kimi nüvələrin dalğa funksiyasını daxil etməklə nəzərə almaq olar. Bu məqsədlə kristalın hamiltonianını aşağıdakı kimi təsvir etmək olar:

$$\hat{H}_z = \sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \Delta_\alpha \right) + \hat{U}_\alpha + \hat{E}_e(\dots, \bar{R}_\alpha, \dots) \quad (2.2.5)$$

operatorunu kristalın hamiltonianının nüvə hissəsi adlandıraraq. Onda (2.1.11), (2.1.17), (2.2.1) və (2.2.5)-dən

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_z - \hat{E}_e \quad (2.2.6)$$

alırıq. Kristalın Ψ dalğa funksiyasını hasil kimi təsvir edək:

$$\Psi(\dots, \bar{r}_i, \dots; \dots, \bar{R}_\alpha, \dots) = \Psi(\dots, \bar{r}_i, \dots; \dots, \bar{R}_\alpha, \dots) \Phi_z(\dots, \bar{R}_\alpha, \dots) \quad (2.2.7)$$

bunu kristall üçün Şredinger tənliyində yerinə qoyub $\Phi_z(\vec{R}_1, \dots)$ üçün tənliyi müəyyən etmək olar:

$$\hat{H}\Psi = (\hat{H}_c + \hat{H}_z - \hat{E}_c)\Psi_c\Phi_z = \Phi_z\hat{H}_c\Psi_z + H_z\Psi_c\Phi_z - \hat{E}_c\Psi_z\Phi_z = E\Psi_c\Phi_z \quad (2.2.8)$$

və ya (2.2.3)-ü nəzərə alaraq

$$\hat{H}\Psi = \hat{H}_z\Psi_c\Phi_z = E\Psi_c\Phi_z = E\Psi \quad (2.2.9)$$

yazmaq olar. Ψ_c -nüvələrin koordinatlarından asılı olduğundan $\hat{H}_z\Psi_c$ dalğa funksiyasına təsir edir. Məsələn,

$$\Delta_\alpha\Phi_z\Psi_c = \Delta_\alpha(\Psi_c\Delta_\alpha\Phi_z + \Phi_z\Delta_\alpha\Psi_c) = \Psi_c\Delta_\alpha\Phi_z + \Phi_z\Delta_\alpha\Psi_c + 2(\Delta_\alpha\Phi_z \cdot \Delta_\alpha\Psi_c)$$

Bu ifadəni nəzərə alaraq (2.2.9) münasibətini

$$\hat{H}_z\Psi_c\Phi_z = \sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \right) [\Psi_c\Delta_\alpha\Phi_z + \Phi_z\Delta_\alpha\Psi_c + 2(\nabla_\alpha\Psi_c \nabla_\alpha\Phi_z)] + \quad (2.2.10)$$

$$+ U_{z_c}\Phi_z + E_c\Psi_c\Phi_z = E\Psi_c\Phi_z$$

kimi yazmaq olar. Bu tənliyi soldan Ψ^* -ya vurub, elektronların koordinatları üzrə inteqrallasaq,

$$\int \Psi_c^*\Psi_c d\tau_c = 1 \quad (2.2.11)$$

olduğunu nəzərə alaraq

$$\sum_\alpha \left(-\frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \right) [\Delta_\alpha\Phi_z + \Phi_z \int \Psi_c^*\Delta_\alpha\Psi_c d\tau_c + 2(\nabla_\alpha\Phi_z \int \Psi_c^*\nabla_\alpha\Psi_c d\tau_c)] + \quad (2.2.12)$$

$$+ U_z\Phi_z + E_c\Phi_z = E\Phi_z$$

alarlıq. (2.2.5) işarələməsini (2.2.12)-də nəzərə alsaq

$$\hat{H}_z\Phi_z = E\Phi_z + \sum_\alpha \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} [\Phi_z \int \Psi_c^*\Delta_\alpha\Psi_c d\tau_c + 2(\nabla_\alpha\Phi_z) \int \Psi_c^*\nabla_\alpha\Psi_c d\tau_c] \quad (2.2.13)$$

tənliyini alarıq. Bu tənliyi soldan Φ_z^* -yə vurub nüvələrin koordinatları üzrə inteqrallama aparsaq, kristalın enerjisi üçün

$$\int \Phi_z^*\hat{H}_z\Phi_z d\tau_z = E + \delta E \quad (2.2.14)$$

ifadəsini alarıq. δE kəmiyyətini qiymətləndirmək üçün

$$\delta E = \sum_\alpha \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \int \Psi_c^*\Delta_\alpha\Psi_c d\tau_c + \sum_\alpha \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \left(2 \int \Phi_z^*\nabla_\alpha\Phi_z d\tau_z \int \Psi_c^*\nabla_\alpha\Psi_c d\tau_c \right) \quad (2.2.15)$$

ifadəsində Ψ_c -nin \vec{r}_i və \vec{R}_α koordinatlarından asılılıqlarının xarakteri barədə müəyyən mülahizələr irəli sürmək lazım gəlir. Uyğun hesablamalar göstərir ki, bütün düzəlişləri atsaq, ümumi enerji $\sqrt{m/\mu} E$ -dən çox olmur (məsələn, germanium elementi üçün bu kənar çıxıma $\sim 0,3$ % təşkil edir). Ona görə də kifayət qədər dəqiqliklə

$$\hat{H}_z\Phi_z = E_z\Phi_z = E\Phi_z \quad (2.2.16)$$

yazmaq olar, başqa sözlə, kristalın tam enerjisi böyük dəqiqliklə hamiltonianın nüvə hissəsinin məxsusi qiyməti ilə üst-ystə düşür.

Deyilənlərdən görünür ki, adiabatik yaxınlaşmada kristalın dalğa funksiyası

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_1, \dots) = \Phi_z(\vec{R}_1, \dots) \Psi_e(\vec{r}_1, \dots; R_1, \dots) \quad (2.2.17)$$

kimi yazıla bilər. Ψ_e və Φ_z

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e,$$

$$\hat{H}_z \Phi_z = E_z \Psi_z = E \Phi_z$$

tənliklərindən tapıla bilər.

Beləliklə, adiabatik yaxınlaşmada elektronların dalğa funksiyası nüvələrin ani vəziyyəti ilə təyin olunur (\hat{H}_e -də U_{ez} həddi), eyni zamanda nüvələrin dalğa funksiyası elektronların ortalaşmış sahəsi ilə müəyyən olunur (\hat{H}_z -də E_e həddi).

§ 2.3. Birelektronlu yaxınlaşma. Hartri-Fok metodu

Adiabatik yaxınlaşmada elektronların dalğa funksiyası aşağıdakı tənliyi ödəməlidir:

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (2.3.1)$$

və ya

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i, \alpha} U_{i\alpha} \right] \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (2.3.2)$$

Bu tənlik həll oluna bilmir, onu bir zərrəcik üçün olan tənliyə gətirmək lazımdır. (2.3.2) tənliyindən görünür ki, əgər fərz etsək ki, elektronlar qarşılıqlı təsirdə deyillər, onda $U_{ij}=0$ olduğundan bu tənlik tənliklər sisteminə parçalanır.

Kristal qəfəsdə atomların daxili səviyyələrindəki elektronların halı praktiki dəyişmədiyindən yalnız valent elektronları ilə kifayətlənmək, \vec{R}_α^0 koordinatlarını isə nüvələrə deyil, atom qalıqlarına aid etmək olar. Bu zaman Şredinger tənliyini fikrə olunmuş atom qalıqlarının potensial sahəsində hərəkət edən valent elektronları üçün yazmaq olar.

Aparılan sadələşmələrə baxmayaraq (2.3.2) tənliyini yenə də ümumi halda həll etmək mümkün olmur, çünki tənlik hələ də çoxlu sayda elektronu əhatə edir. Çoxsaylı elektronlar məsələsini birelektronluya gətirmək üçün aşağıdakı sadələşmələri həyata keçirirlər: elektronların cüt-cüt qarşılıqlı təsir enerjilərini hər bir elektronun qalan bütün elektronların ortalaşmış sahəsi ilə qarşılıqlı təsir enerjisi ilə əvəz edirlər. Bu sahə özünə uzla-

şan sahə adlanır, belə ki, o, yalnız verilmiş elektronun hərəkətini təyin etmir, həm də özü onun hərəkətindən asılıdır. Özünə uzlaşan sahə halında kristaldakı elektronlara qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sistemi kimi baxmaq olar. Onda elektronların cüt-cüt qarşılıqlı təsir enerjilərinin ikiqat cəmini i -ci elektronun koordinatlarından asılı $\Omega_i = \Omega_i(\vec{r}_i)$ potensial enerjilərin cəmi ilə əvəz etmək olar:

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \rightarrow \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) \quad (2.3.3)$$

Onda özünə uzlaşan sahə halında hamiltoniani

$$\begin{aligned} \hat{H}_e &= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{i, \alpha} U_{i\alpha} = \\ &= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) + \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) + \sum_i \left(\sum_{\alpha} U_{i\alpha} \right) = \sum_i \hat{H}_i \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

kimi yazmaq olar. Burada i -ci elektronun hamiltoniani

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \Omega_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i); \quad (2.3.5)$$

kimidir. $\Omega_i(\vec{r}_i)$ i -ci elektronun qalan bütün elektronların, $U_i(\vec{r}_i)$ - isə bütün nüvələrin sahələrindəki potensial enerjisidir. Artıq hamiltoniana elektronların qarşılıqlı təsir enerjiləri daxil olmadığından, elektronlar sisteminin dalğa funksiyası ayrı-ayrı elektronların dalğa funksiyaları hasilinə şəklinə düşür, sistemin enerjisi isə ayrı-ayrı elektronların enerjiləri cəminə bərabər olur:

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \prod_i \Psi_i(\vec{r}_i), \quad (2.3.6)$$

$$E_e = \sum_i E_i, \quad (2.3.7)$$

belə ki,

$$\hat{H}_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (2.3.8)$$

Deməli, özünə uzlaşan sahə daxil etdikdə çoxelektronlu məsələ bielektronluğa gətirilir.

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ -nin şəklini tapmaq üçün kristalın hamiltonianının elektron hissəsi üçün Şredinger tənliyini iki formada yazaq:

$$\hat{H}_e \Psi_e = \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \Psi_e + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \Psi_e - \sum_i U_i(\vec{r}_i) \Psi_e \right] = E_e \Psi_e \quad (2.3.9)$$

$$\hat{H}_e \Psi_e = \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \right) \Psi_e + \sum_{i \neq j} \Omega_i(\vec{r}_i) \Psi_e + \sum_i U_i(\vec{r}_i) \Psi_e \right] = E_e \Psi_e \quad (2.3.10)$$

Eyni bir tənliyin bu iki müxtəlif forması $\Omega_i(\vec{r}_i)$ operatorunu təyin edir, amma onu

$$\Omega_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_{j(j \neq i)} U_{ij} \quad (2.3.11)$$

bərabərliyi ilə təyin etmək olmaz, çünki $\Omega_i(\vec{r}_i)$ yalnız i -ci elektronun koordinatlarından asılı olmalıdır, halbuki, $\sum_{j(j \neq i)} U_{ij}$ cəmi bütün elektronların koordinatlarından asılıdır. (2.3.11) və (2.3.3) tənlikləri mənalarmı itirirlər, belə ki, (2.3.9) və (2.3.10) tənliklərinin ayrı-ayrı vuruqlarını deyil, özlərini bərabərləşdirmək lazım gəlir.

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ -ni tapmaq üçün (2.3.9) və (2.3.10) tənliklərini soldan Ψ_e^* -ya vurub, bütün elektronların koordinatlarına görə inteqrallayaraq, (2.3.10) tənliyini (2.3.9)-dan çıxmaq. Sağda sıfır alınır. Birinci və üçüncü hədlər sıfır verir və nəticədə

$$\frac{1}{2} \int \Psi_e^* \sum_{j(j \neq i)} U_{ij} \Psi_e d\tau_e - \int \Psi_e^* \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) \Psi_e d\tau_e = 0 \quad (2.3.12)$$

və ya

$$\sum_i \int \Psi_e^* \Omega_i(\vec{r}_i) \Psi_e d\tau_e = \sum_i \int \Psi_e^* \frac{1}{2} \sum_{j(j \neq i)} U_{ij} \Psi_e d\tau_e \quad (2.3.13)$$

alırıq. $\Omega_i(\vec{r}_i)$ elektronlar üçün olan məsələni qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sisteminə gətirdiyindən, Ψ_e -ni ayrı-ayrı zərrəciklərin dalğa funksiyalarının hasili kimi yazmaq olar:

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \prod_i \Psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.3.14)$$

$d\tau_e = d\tau_1, d\tau_2, \dots$ olduğunu nəzərə alaraq, (2.3.13)-ün şəklini dəyişək

$$\begin{aligned} \sum_i \int \Psi_i^*(\vec{r}_i) \dots \Omega_i(\vec{r}_i) \Psi_i(\vec{r}_i) \dots d\tau_1 d\tau_2 \dots &= \sum_i \int \Psi_i^*(\vec{r}_i) \Omega_i(\vec{r}_i) \Psi_i(\vec{r}_i) d\tau_i d\tau_j = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i, j \neq i} \int \Psi_i^*(\vec{r}_i) \dots U_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \Psi_j(\vec{r}_j) \dots d\tau_i d\tau_j \dots = \\ &= \sum_i \int \Psi_i^*(\vec{r}_i) \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int \Psi_j^*(\vec{r}_j) U_{ij} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \Psi_j(\vec{r}_j) d\tau_j \right] \Psi_i d\tau_i, \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

(2.3.15) tənliyində ikinci və sonuncu hədlərin müqayisəsindən

$$\Omega_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \left| \int \Psi_j^*(\vec{r}_j) \right|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} d\tau_j \quad (2.3.16)$$

yazmaq olar.

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ -nin ifadəsi aşağıdakı mənanı kəsb edir: $e(\psi_j(\vec{r}_j))^2$ \vec{r}_j nöqtəsində j -ci elektronun elektron buludunun yük sıxlığıdır; $e(\psi_j(\vec{r}_j))^2 d\tau_j$

nöqtəsində potensialı təyin edən yük elementidir. j-cı elektronun koordinatlarının bütün qiymətləri üzrə inteqrallama apararaq, i-ci elektronun «yayılmış» j-cı elektronla qarşılıqlı təsir enerjisini alırıq.

(2.3.16) ifadəsini (2.3.8)-də yerinə yazsaq, $\Psi_i(\vec{r}_i)$ funksiyasını təyin etmək üçün aşağıdakı tənliyi alırıq

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i(\vec{r}_i) + \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \int |\Psi_j^*(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2 d\tau_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right] + \Psi(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots) \Psi_i(\vec{r}_i) = \sum_i \Psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.3.17)$$

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ -ni tapmaq üçün bütün $\Psi(\vec{r}_j)$ -lər məlum olmalıdır. Onun üçün də bütün $\Omega_i(\vec{r}_i)$ -ləri bilmək lazım gəlir. (2.3.17) tənliyi inteqrodiferensial tənlik olub **Hartri tənliyi** adlanır. Onun həllini ardıcıl yaxınlaşma üsulu ilə axtarmaq olar. Sıfırıncı yaxınlaşmada hər hansı $\psi_0^0(r_j)$ funksiyasını götürüb, onun köməyi ilə $\Omega_i^{(0)}(\vec{r}_i)$ -ni hesablamaq olar. Sonra $\Omega_i^{(0)}(\vec{r}_i)$ -ni (3.17)-də yerinə yazaraq $\Psi_i^{(1)}(\vec{r}_i)$ tapılır, onların köməyi ilə $\Omega_i^{(1)}(\vec{r}_i)$ hesablanır və sairə. Bu əməliyyat o vaxta qədər davam etdirilir ki, (n+1)-ci yaxınlaşma verilən dəqiqlik çərçivəsində n-ci yaxınlaşma ilə üst-üstə düşsün. Hartri tənliyinin çatışmamazlığı ondadır ki, o, Pauli prinsipini nəzərə almır. Pauli prinsipinin nəzərə alınması Hartri-Fok tənliyinə gətirib çıxarır. Pauli prinsipi koordinat və spin proyeksiyalarını nəzərə almaqla iki elektronun yerdəyişməsinə nəzərən elektronların dalğa funksiyalarının antisimmetrik olmasını tələb edir. Eyni zamanda $\prod_i \Psi_i(\vec{r}_i)$ bu şərti ödəmir.

Ayrı-ayrı elektronların dalğa funksiyalarının düzgün kombinasiyası Sleter determinantı şəklində verilir:

$$\Psi_e(q_1, q_2, \dots) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(q_1) & \Psi_1(q_2) & \dots \\ \Psi_2(q_1) & \Psi_2(q_2) & \dots \end{vmatrix}, \quad (2.3.18)$$

burada N-elektronların sayı, q_i isə x_i, y_i, z_i və S_{z_i} kimi dörd dəyişəndən ibarət toplunu ifadə edir.

Ψ_e dalğa funksiyası

$$\Psi_e(\dots \vec{q}_i, \dots \vec{q}_k) = -\Psi_e(\dots \vec{q}_k, \dots \vec{q}_i \dots) \quad (2.3.19)$$

$$\int \Psi_e^* \Psi_e dq_e = 1$$

şərtini ödəyir. Ψ_e üçün Sleter determinantı şəklindəki ifadəsindən istifadə edərək, E_i enerjisi üçün

$$E_i = \int \Psi_e^*(q_1, \dots) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(\bar{r}_1, \bar{R}_1, \bar{R}_2, \dots) \right] \Psi_e dq_e + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \int \Psi_e^*(\bar{q}_1, \dots) \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_e(q_1, \dots) dq_e \quad (2.3.20)$$

ifadəsini alırıq. dq_e ilə elektronlar sisteminin konfigurasiya fəzasında spin dəyişəni daxil olan həcm elementi işarə olunmuşdur. dq_e üzrə inteqrallama bütün elektronların koordinatları üzrə və cəmləmə spin dəyişənləri üzrə aparılır.

(2.3.20)-də birinci inteqral Hartri tənliyindəki uyğun həddən fərqlənmediyi halda, ikinci hədd özündə mübadilə enerjisi olması ilə fərqlənir. Hartri tənliyində olmayan bu fərq onunla əlaqədardır ki, dq_e üzrə inteqrallamada elektronların i və j koordinatları daxil olan hədləri saxlamaq lazımdır ki, bunlar Ψ_k, Ψ_e, Ψ'_k və Ψ'_e kimi istənilən hallarda ola bilərlər:

$$\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \int \Psi_e(\bar{q}_1, \dots) \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_e(q_1, \dots) dq_e = \frac{1}{8\pi\epsilon_0 N!} \sum_i \sum_{k, \ell} (-1)^{k+\ell} \times \int \Psi_e^*(\bar{q}_i) \Psi_\ell^*(\bar{q}_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \Psi_k(q_i) \Psi_\ell(q_j) dq_i dq_j \quad (2.3.21)$$

$k = \ell$ *olduqda elektronların adi kulon qarşılıqlı təsir enerjisini*, $k \neq \ell$ *olduqda isə mübadilə enerjisini alırıq*. Bununla belə Hartir-Fok üsulu ilə Şredinqer tənliyinin kristal üçün həlli praktiki qeyri- mümkündür.

§ 2.4. Kristal qəfəsin periodik sahəsi. Blox dalğası

Əvvəlki bölmədə göstərilirdi ki, birelektronlu Şredinqer tənliyi aşağıdakı şəkildədir:

$$[(-\hbar^2/2m)\Delta + U(\bar{r})]\Psi(\bar{r}) = E\Psi(\bar{r}), \quad (2.4.1)$$

burada $U(\bar{r}) = U_i(\bar{r}_i) = \Omega(\bar{r}_i) + V_i(\bar{r}_i)$ elektronun kristal qəfəsin sahəsi və qalan bütün elektronlarla qarşılıqlı təsir enerjisidir və deməli, qəfəsin xassələrindən asılıdır.

Yuxarıda göstərilirdi ki, kristal qəfəsin ən mühüm xüsusiyyətlərindən biri onun periodikliyidir. Belə ki, \bar{n} - translyasiya vektoru qədər sürüşmədə ilkin nöqtə ilə identik olan nöqtə alınır: $\bar{n} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3$, $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ qəfəsin bazisidir. Onda, aydındır ki, potensial enerji üçün periodiklik şərti

$$U(\bar{r} + \bar{n}) = U(\bar{r}) \quad (2.4.2)$$

şəklində olmalıdır.

Operator şəklində bu şərt

$$\hat{T}(\bar{n})U(\bar{r}) = U(\bar{n} + \bar{r}) \quad (2.4.3)$$

kimi yazıla bilər, burada $\hat{T}(\bar{n})$ - translyasiya operatoru adlanır.

(2.4.2) tənliyindən görünür ki, \bar{r} və $\bar{n} + \bar{r}$ nöqtələri fiziki ekvivalentdirlər. Deməli, Şredinger tənliyində \bar{r} əvəzində $\bar{r} + \bar{n}$ yazsaq, $\bar{r} + \bar{n}$ arqumentinə müvafiq dalğa funksiyası $\Psi(\bar{r})$ dalğa funksiyasından C_n sabit vuruqla fərqlənər:

$$\Psi(\bar{r} + \bar{n}) = C_n \Psi(\bar{r})$$

Bu o deməkdir ki, translyasiya vektoru qədər sürüşmədə $U(\bar{r})$ potensial sahəsinin periodikliyi üzündən dalğa funksiyasının modulu $|\Psi(\bar{r})|$ dəyişməz qalır, onun yalnız fazası dəyişir.

$\Psi(\bar{r} + \bar{n})$ dalğa funksiyası üçün normalaşma şərti

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{r} + \bar{n}) \Psi^*(\bar{r} + \bar{n}) d\bar{r} = |C_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{r}) \Psi^*(\bar{r}) d\bar{r} \quad (2.4.4)$$

kimidir. Digər tərəfdən məlumdur ki,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\bar{r}) \Psi^*(\bar{r}) d\bar{r} = 1, \quad (2.4.5)$$

onda $|C_n|^2 = 1$ alınır. Bu o deməkdir ki, C_n ya vahidə, ya da xəyali üstlü eksponentə bərabərdir. Dalğa funksiyasının kristaldan keçməsinə təsvir etdiyini nəzərə alaraq, C_n -in xəyali eksponent olduğunu qəbul etməli oluruq. Eksponentin üstünün adsız ədəd, \bar{n} -in isə ölçüsünün uzunluq vahidi (M) olduğunu nəzərə alıb, üçtdə m^{-1} ölçü vahidinə malik əlavə vuruq olduğu qənaətinə gəlirik. Bu kəmiyyət *dalğa vektoru* adlanır və \bar{k} ilə işarə olunur. Bu kəmiyyətin modulu *dalğa ədədi* adlanır və onun *fiziki mənası* 2π parçasında yerləşən dalğalar sayılır:

$$|\bar{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.4.6)$$

Beləliklə,

$$C_n = e^{i\bar{k}\bar{n}} \quad (2.4.7)$$

alınır və kristal qəfəsin periodik sahəsinin sərbəst elektronun dalğa funksiyasına təsiri riyazi şəkildə bu funksiyanın qarşısında əlavə vuruq kimi meydana çıxır:

$$\Psi(\bar{r} + \bar{n}) = e^{i\bar{k}\bar{n}} \Psi(\bar{r}) \quad (2.4.8)$$

Bu şərt elektronun dalğa funksiyasının kristalda *translyasiya xassəsi* adlanır. Operator şəklində bu xassə

$$\hat{T}(\vec{n})\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{n}}\Psi(\vec{r}) \quad (2.4.9)$$

kimi yazılır. Burada $\Psi(\vec{r})$ translyasiya operatorunun məxsusi funksiyası, $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ isə onun məxsusi qiymətidir. Kvant mexanikəsindən məlum olduğu kimi, hamiltonian \hat{H} və translyasiya operatoru $\hat{T}(\vec{r})$ öz aralarında komutasiya edirlər, deməli, onlar ümumi dalğa funksiyaları sisteminə malikdirlər. Buradan alınır ki, elektronun kristalda hərəkəti zamanı hamiltonianın dalğa funksiyaları translyasiya şərtini ödəyirlər və dalğa funksiyası \vec{k} – dalğa vektorundan asılı olur: $\Psi = \Psi(\vec{k})$.

Aydındır ki, hamiltonianın məxsusi qiymətləri – sistemin enerjisi də \vec{k} – dalğa vektorundan asılı olacaqdır: $E = E(\vec{k})$.

Bu ifadə kristalda elektronun enerjisinin *dispersiya qanunu* adlanır. $E(\vec{r})$ və $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ *asılılıqlarının axtarışı bərk cismlər fizikasının zona nəzəriyyəsinin əsas məsələsidir*.

Elektronun kristalın periodik sahəsində hərəkəti üçün Şredinger tənliyinin həlli şəklinə baxaq. Bunun üçün (2.4.8) tənliyinin hər iki tərəfini $e^{-i\vec{k}(\vec{r}+\vec{n})}$ vuruğuna vuraq:

$$e^{-i\vec{k}(\vec{r}+\vec{n})}\Psi(\vec{r}+\vec{n}) = e^{-i\vec{k}\vec{r}-i\vec{k}\vec{n}+i\vec{k}\vec{n}}\Psi(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\vec{r}}\Psi(\vec{r})$$

$e^{-i\vec{k}\vec{r}}\Psi(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ işarələməsini qəbul etsək, bu ifadə aşağıdakı şəkllə düşər:

$$e^{-i\vec{k}(\vec{r}+\vec{n})}\Psi(\vec{r}+\vec{n}) = e^{-i\vec{k}\vec{r}}\Psi(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

və deməli, $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) - u(\vec{r})$ potensial sahəsi kimi eyni periodikliyə malikdir:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{n}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.4.10)$$

Onda elektronun kristalda hərəkəti üçün Şredinger tənliyinin həlli olan $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyası

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.4.11)$$

şəklində olar.

Beləliklə, kristalın potensial sahəsinin periodikliyi şərtindən istifadə edərək Şredinger tənliyini həll etmədən, elektronun dalğa funksiyasının şeklini müəyyən etdik. (2.4.11) ifadəsindən alınır ki, ideal kristal üçün Şredinger tənliyinin həlli kristal qəfəs periodikliyi ilə amplituda görə modullaşmış müstəvi dalğadır ($e^{i\vec{k}\vec{r}}$). Bu həll *Blox dalğası* və ya *funksiyası* adlanır. Blox dalğasının ifadəsindən görünür ki, o, n-dən asılı deyil. $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ müstəvi dalğasını kristal qəfəs taktında modullaşmış $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dəyişən amplitu-

tudlu dalğa funksiyası kimi təsəvvür edirik. Müxtəlif dalğa vektorları üçün $\varphi_i(\vec{r})$ müxtəlif olduğundan, $\varphi_i(\vec{r})$ işarələməsi qəbul olunur.

Blox dalğasını de Broyl dalğası $\Psi_k(\vec{r}) = Ae^{ik\vec{r}}$ ilə müqayisə etdikdə o, daha əyani fiziki məna kəsb edir. Əgər elektron yerini sərbəst fəzadan kristala dəyişirsə, onda, təbiidir ki, kristalın periodik sahəsinin təsiri ilə (2.4.10) ifadəsinə uyğun olaraq, elektronun dalğa funksiyası kristal qəfəs sabiti periodu ilə modullaşacaqdır.

§2.5. Kvaziimpuls

Fizikada nəzərdən keçirilən bir çox kəmiyyətlər mühüm xassəyə-saxlanma xassəsinə malikdirlər. Bu o deməkdir ki, müəyyən şəraitdə həmin kəmiyyətlər dəyişməz qalırlar. Qapalı sistemlər üçün koordinat və sürətin elə funksiyaları mövcuddur ki, hərəkət zamanı onların qiymətləri sabit qalır. Bu funksiyalar **hərəkət inteqralları** adlanır. Aralarında sərt qarşılıqlı təsir olmayan N zərrəcikdən imbarət sistem üçün $6N-1$ sayda hərəkət inteqralı tərtib etmək mümkündür ki, onlardan da mühüm maraq kəsb edənlər additivlik xassəsinə malik olanlardır. Additiv hərəkət inteqralları **enerji, impuls və impuls momentləridir**. Buna uyğun olaraq əsasən üç saxlanma qanunu –enerjinin saxlanması, impulsun saxlanması və impuls momentinin saxlanması qanunları çox mühümdür. Bu qanunlar fəza və zamanın əsas xassələri ilə sıx bağlıdırlar.

Enerjinin saxlanması qanununun əsasında **zamanın bircinsliliyi**, başqa sözlə, zamanın bütün anlarının eyniliyi durur. Bunu o mənada başa düşmək lazımdır ki, t_1 zaman anını zərrəciklərin koordinat və sürətlərini dəyişmədən t_2 zaman anı ilə əvəz etdikdə sistemin mexaniki xassələri dəyişmir. Bu o deməkdir ki, göstərilən əvəzləmədən sonra istənilən t_2+t anında zərrəciklərin koordinat və sürətləri əvəzləməyə qədərki t_1+t anındakı qiymətlərə malik olsunlar.

İmpulsun saxlanması qanununun əsasında **fəzanın bircinsliliyi** durur. Bunu o mənada başa düşmək lazımdır ki, qapalı sistemi zərrəciklərin qarşılıqlı vəziyyətini və sürətlərini dəyişmədən bir yerdən başqa yerə paralel köçürərkən sistemin mexaniki xassələri dəyişməz qalır (burada nəzərə alınır ki, yeni yerdə sistemin qapalılıq şərti pozulmur).

Nəhayət, impuls momentinin saxlanması qanununun əsasında **fəzanın izotropluğu**, başqa sözlə, bütün istiqamətlərdə fəzanın eyniliyi durur ki, bu da qapalı sistemin bütövlükdə dönməsinin onun mexaniki xassələrində öz əksini tapması kimi başa düşülməlidir.

İmpuls $\vec{p} = m\vec{v}$ sabit potensial enerjili fəzada zərrəciklərin hərəkəti

zamanı saxlanılır. İmpuls momenti $\vec{M} = [\vec{r}\vec{p}], U(\vec{r}) = U(r)$ mərkəzi simmetriyalı sahədə saxlanılır.

Kvant mexanikasında bu kəmiyyətlər operator şəklində aşağıdakı kimi yazılır. Əgər zamandan asqar şəkildə asılı olmayan L kəmiyyətinə uyğun \hat{L} operatoru Hamilton operatoru ilə kommutativ olarsa, yəni

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = [\hat{H}, \hat{L}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L}] \quad (2.5.1)$$

şərti ödənilərsə, bu kəmiyyət saxlanılır.

Kristalın periodik sahəsində hərəkət edən elektronu nəzərdən keçirərkən belə qənaətə gəlmək olar ki, qəfəsin potensial sahəsinin translyasiyası simmetriyasına zərrəciyin bu sahədə hərəkəti zamanı saxlanılan hər hansı bir kəmiyyət uyğun olmalıdır. Bu kəmiyyət kvaziimpuls adlandırılır. Bunun üçün ən sadə əsas onun dimenzionunun impulsun dimenzionu ilə eyni olmasıdır.

Belə ki, translyasiya simmetriyası ixtiyari tam sayda kristallik qəfəs periodu qədər sürüşmədə fəzanın xassələrinin dəyişməzliyini əks etdirəndən, kvaziimpulsda fəzanın bircinsliliyini əks etdirən impuls kimi eyni dimenziona malik olmalıdır. Sonralar kvaziimpulsun xassələrinin impulsun xassələrinə oxşar olması göstəriləcəkdir.

\hat{P} kvaziimpulsa qəfəsin Hamilton operatoru ilə kommutativ olan \hat{P} operatoru uyğun olmalıdır:

$$\hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P} = 0 \quad (2.5.2)$$

Beləliklə, təsdiq edə bilərik ki, qəfəsin periodik sahəsində elektronun hərəkəti zamanı \hat{H} və \hat{P} operatorlarının məxsusi funksiyaları üst-üstə düşməlidir. Onların məxsusi qiymətləri arasında isə aşağıdakı kimi hər hansı funksional asılılıq olmalıdır:

$$E = E(\vec{p}) \quad (2.5.3)$$

Başqa sözlə, elektronların enerjisi kvaziimpulsun funksiyası olmalıdır.

Kristaldakı elektrona qəfəsin periodik sahəsi təsir edir və bu qarşılıqlı təsirin potensial enerjisi koordinatın periodik funksiyasıdır. Deməli, elektron kristalda hərəkət edərkən periodik sahənin təsiri ilə o, impuls və enerjisini dəyişir. Həqiqətən də $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ impuls operatoru, kristalda elektron üçün

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(r)$$

Hamilton operatoru ilə kommutasiya etmir

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p}] = \frac{1}{i\hbar} \left[i\hbar\nabla \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \hat{U}(r) \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(r) \right) i\hbar\nabla \right] = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{i\hbar^3}{2m} \nabla^2 - i\hbar\nabla\hat{U} - \frac{i\hbar^3}{2m} \nabla^3 + \hat{U}i\hbar\nabla \right] = -\nabla\hat{U} + \hat{U}\nabla = -(\nabla, \hat{U}) = F_i \neq 0, \quad (2.5.4) \end{aligned}$$

başqa sözlə, $\hat{p} \neq \text{const}$.

Eyni zamanda aydındır ki, \hat{p} və \hat{P} arasında müəyyən əlaqə olmalıdır. Həqiqətən, $\nabla U \rightarrow 0$ şərtində, yeni qəfəsin periodik sahəsinin potensial enerjisi sabitə yaxınlaşarsa, impuls və kvaziimpuls eyniləşməlidir. Bu isə o deməkdir ki, kvaziimpuls operatoruna kristalın $U(r)$ –potensial sahəsinin şəklindən asılı olaraq $\nabla U \rightarrow 0$ şərtində sıfıra yaxınlaşan kəmiyyət daxil olmalıdır. Bu isə \hat{P} üçün aşağıdakı ifadəni yazmağa imkan verir:

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla + i\hbar\hat{\gamma}(r) \quad (2.5.5)$$

burada $\nabla U \rightarrow 0$ şərtində $\hat{\gamma}(r) \rightarrow 0$. $\hat{\gamma}(r)$ -in mövcudluğu \hat{P} və \hat{H} arasında kommutativlik şərtinin ödənilməsinə imkan verməlidir.

\hat{P} operatorunun şəklini ψ_k -nin kvaziimpuls operatorunun məxsusi funksiyası olması, yeni

$$\hat{P}\psi_k(r) = \bar{P}\psi_k(r) \quad (2.5.6)$$

şərtini nəzərə almaqla axtarmaq olar. Bunun üçün ψ_k -ni Blox dalğaları, \bar{P} -kvaziimpuls operatorunu isə $-i\hbar\nabla + i\hbar\hat{\gamma}$ şəklində təsvir etmək lazımdır. Onda $\hat{\gamma}$ -ni tapmaq üçün aşağıdakı tənliyi alırıq:

$$\begin{aligned} \hat{P}\psi_k(\vec{r}) &= -i\hbar\vec{k}\psi_k(\vec{r}) + e^{i(\vec{k}\vec{r})}(-i\hbar\nabla\varphi_k(\vec{r})) + i\hbar\hat{\gamma}\psi_k(\vec{r}) = \\ &= \hbar\vec{k}\psi_k(\vec{r}) + i\hbar\left[\hat{\gamma} - \nabla \ln\varphi_k(r)\right]\psi_k(\vec{r}) = \bar{P}\psi_k(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

Bu tənlikdən

$$\bar{P} = \hbar\vec{k} \quad (2.5.8)$$

və

$$\hat{\gamma} = (\nabla \ln\varphi_k(\vec{r})) \quad (2.5.9)$$

yazmaq olar. Buradan görünür ki, $\hat{\gamma}$ -vurma operatorudur və o, $\varphi_k(r)$ periodik funksiyası vasitəsilə $U(r)$ potensial sahəsinin şəklindən asılıdır.

$\nabla U(r)$ sıfıra yaxınlaşdıqda $\varphi_k(r)$ sabitə yaxınlaşır. Onda $\hat{\gamma} \rightarrow 0$ və bu da kvaziimpuls və impulsun limit halında eyniliyini təmin edir.

Beləliklə, kvaziimpuls operatoru

$$\hat{P}(\vec{r}) = -i\hbar\nabla + i\hbar(\nabla \ln \varphi_k(\vec{r})), \quad (2.5.10)$$

şəklində olur.

Fərz edək ki, $U(\vec{r})$ periodik sahəsinə bununla eyni periodikliyə malik olmayan hər hansı $V(\vec{r})$ sahəsi əlavə olunmuşdur. Bu halda

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (2.5.11)$$

yazmaq olar. \hat{P} -nin qəfəs sahəsinin \hat{H}_0 hamiltonianı ilə, $(\nabla \ln \varphi_k)$ -nin isə \hat{V} ilə kommutasiya etdiyini (onların hər ikisi vurma operatoru olduqlarından) nəzərə alsaq, kvaziimpulsun zamana görə törəməsi \hat{F}_a -xarici qüvvəyə bərabər olar:

$$\hat{F}_a = -(\nabla V). \quad (2.5.12)$$

Həqiqətən də

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = [\hat{H}, \hat{P}] = [\hat{V}\hat{P}] = \frac{1}{i\hbar} \left\{ (-i\hbar\nabla)V - V(-i\hbar\nabla) \right\} = -(\nabla V) = \hat{F}_a \quad (2.5.13)$$

Beləliklə, kvaziimpuls potensial sahənin qeyri-periodik $-(\nabla V(\vec{r}))$ hissəsinin təsiri altında dəyişir. Bu isə o deməkdir ki, kristal qəfəsin ideal periodikliyinə istənilən pozuntuları \hat{P} kvaziimpulsunun dəyişməsinə səbəb olur və onda qəfəsin ideal quruluşunun ixtiyari pozuntularında elektron, fonon və s. kimi dalğaların səpilməsi baş verməlidir.

$U(\vec{r})$ -in periodikliyinə belə pozuntuları qəfəsin istilik rəqsləri və müxtəlif təbiətli defektlərdir. Bu pozuntulardakı səpilmələr kristalda elektrik cərəyanı keçərkən **elektrik müqavimətinin**, istilikkeçirmədə **istilik müqavimətinin** və s. kimi hadisələrin **fiziki səbəbləridir**. Əgər ideal kristala xarici $V(\vec{r})$ qüvvə sahəsi əlavə etsək, onda kvaziimpuls yalnız xarici \hat{F}_a qüvvəsinin təsiri altında dəyişdiyi halda, impuls həm \hat{F}_a xarici, həm də $\hat{F}_i = -\nabla U(\vec{r})$ daxili qüvvələrin təsiri nəticəsində dəyişər:

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \hat{F}_i + \hat{F}_a \quad (2.5.14)$$

Elektronun enerjisi \vec{k} -dalğa ədədidindən, ya da $\hat{P} = \hbar\vec{k}$ kvaziimpulsdan asılı olmalıdır. Enerjinin $E(\vec{k})$ və ya $E(\vec{p})$ funksional asılılıqlarının konkret şəkli yalnız hər bir hal üçün

$$\hat{H}\psi_k(\vec{r}) = E(\vec{k})\psi_k(\vec{r}) \quad (2.5.15)$$

Şredinger tənliyinin həllindən tapıla bilər.

φ_k funksiyasının ödədiyi tənliyi müəyyən etmək olar. Bunun üçün

$$\nabla \psi_k(\vec{r}) = i\vec{k} \psi_k(\vec{r}) + e^{i(\vec{k}\vec{r})} [\nabla \varphi_k(r)]; \quad (2.5.16)$$

$$\nabla \psi_k(\vec{r}) = i\vec{k} \left[i\vec{k} \psi_k(\vec{r}) + e^{i(\vec{k}\vec{r})} (\nabla \varphi_k(r)) \right] + i\vec{k} e^{i(\vec{k}\vec{r})} [\nabla \varphi_k(r)] + e^{i(\vec{k}\vec{r})} [\Delta \varphi_k(r)]. \quad (2.5.17)$$

Beləliklə, sonuncu tənliyi Şredinger tənliyində nəzərə alsaq, (2.5.17)-ni və (2.5.15)-də $e^{i(\vec{k}\vec{r})}$ -ə ixtisardan sonra $\varphi_k(r)$ üçün aşağıdakı tənliyi alarıq

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[-k^2 \varphi_k(r) + 2i(\vec{k} \cdot \nabla \varphi_k(r)) + \Delta \varphi_k(r) \right] + U(r) \varphi_k(r) = E(\vec{k}) \varphi_k(r), \quad (2.5.18)$$

və ya

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_k(r) + \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{i\hbar^2}{m} (\vec{k} \cdot \nabla) + U(r) \right] \varphi_k(r) = E(\vec{k}) \varphi_k(r). \quad (2.5.19)$$

Aldığımız son tənlikdən görünür ki, $\varphi_k(r)$ \vec{k} -dalğa vektorunun qiymətlərindən asılıdır, buna görə də onun indeksində \vec{k} yazılır. Enerji həqiqi funksiya olduğundan, yəni

$$E^*(\vec{k}) = E(\vec{k}) \quad (2.5.20)$$

şerti ödənilməyindən kompleks –qoşma $\psi_k^*(r)$ dalğa funksiyası üçün Şredinger tənliyini

$$\hat{H}^* \psi_k^*(\vec{r}) = E(\vec{k}) \psi_k^*(r) \quad (2.5.21)$$

kimi yazmaq olar.

$$H^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \quad (2.5.22)$$

və

$$\psi_k^*(r) = e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \varphi_k^*(r), \quad (2.5.23)$$

olduğunu nəzərə alsaq, $\varphi_k^*(r)$ funksiyası üçün

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_k^*(r) + \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{i\hbar^2}{m} (\vec{k} \cdot \nabla) + U(r) \right] \varphi_k^*(r) = E(\vec{k}) \varphi_k^*(r), \quad (2.5.24)$$

ifadəsini alarıq.

İndi $(-\vec{k})$ dalğa vektoru funksiyası üçün (2.5.19) tənliyini yazaq

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_{-\vec{k}}(r) + \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{i\hbar^2}{m} (\vec{k} \cdot \nabla) + U(r) \right] \varphi_{-\vec{k}}(r) = E(-\vec{k}) \varphi_{-\vec{k}}(r). \quad (2.5.25)$$

Əgər $\varphi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) = \varphi_{-\vec{k}}(\vec{r})$ olarsa, onda (2.5.24), (2.5.25) tənlikləri onlar üçün üst-üstə düşür, bu isə

$$E(\vec{k}) = E(-\vec{k}) \quad (2.5.26)$$

şərtinin ödənilməsi deməkdir, başqa sözlə, enerji **dalğa vektorunun cüt funksiyasıdır**. $\vec{k}=0$ nöqtəsi ətrafında enerji ən azı \vec{k}^2 -dan asılı olmalıdır.

k_x, k_y, k_z fəzası üçün

$$E(\vec{k}) = \text{const} \quad (2.5.27)$$

tənliyi hər hansı sabit enerjili səthi və ya izoenergetik səthi müəyyən edir.

Izoenergetik səthin forması yarımkəçiricilərin bir çox xassələrinin təyində mühüm rol oynayır.

§ 2.6. Elektronun effektiv kütləsi

Fərz edək ki, \vec{k}_0 (və ya \vec{P}_0) ekstremum nöqtəsidir

$$E(\vec{k}_0) = E_0 = E_{\text{ext}} \quad (2.6.1)$$

\vec{k}_0 nöqtəsi ilə yanaşı digər ekstremal nöqtələr də olmalıdır, məsələn, ona simmetrik $-\vec{k}_0$ nöqtəsi. Enerjinin cütlüyü təkcə \vec{k} -ya deyil, onun proyeksiyalarına nəzərən də özünü biruzə verdiyindən, yəni

$$E(k_x, k_y, k_z) = E(-k_x, k_y, k_z) = \dots \quad (2.6.2)$$

olduğundan, təsdiq etmək olar ki, ekstremal nöqtələrin sayı kristalın sahəsinin simmetriya elementləri ilə təyin olunmalıdır. Məsələn, 24 simmetriya elementinə malik kubik qəfəsdə ümumi halda 24 ekvivalent ekstremal nöqtə olmalıdır.

$E(\vec{k})$ -nı ekstremal nöqtələrin birinə nəzərən Teylor sırasına ayıraq:

$$E(\vec{k}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{d^{\ell} E(\vec{k})}{d\vec{k}^{\ell}} \Big|_{\vec{k}_0} \frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^{\ell}}{\ell!} = E(\vec{k}_0) + \frac{dE(\vec{k})}{d\vec{k}} (\vec{k} - \vec{k}_0) + \dots \quad (2.6.3)$$

$d/d\vec{k}$ -vektor arqumentə görə törəmə üç kəmiyyətin cəmindən ibarət (k_x, k_y, k_z toplananlarına müvafiq diferensiallamaqla) olduğundan, bu ifadə ℓ -rənqli tenzor adlanır.

$\ell=0$ olduqda skalyar, $\ell=1$ olduqda isə birinci rənqdan tenzor – vektor alırıq; $\ell=2, 3, \dots$ olduqda isə uyğun olaraq ikinci, üçüncü və s. rənq tenzorlar alınır. Yalnız birinci iki həddi yazsaq- $\ell=1, \ell=2$:

$$\frac{dE}{d\vec{k}} = \left(\frac{\partial E}{\partial k_x}, \frac{\partial E}{\partial k_y}, \frac{\partial E}{\partial k_z} \right); \quad (2.6.4)$$

$$\frac{d^2E}{d\vec{k}^2} = \left(\frac{d}{d\vec{k}} \frac{\partial E}{\partial k_x}, \frac{d}{d\vec{k}} \frac{\partial E}{\partial k_y}, \frac{d}{d\vec{k}} \frac{\partial E}{\partial k_z} \right) =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z} & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \quad (2.6.5)$$

Qarışq töremələr differensiallama ardıcılığından asılı deyil:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i} \quad (2.6.6)$$

Belə tenzor *simmetrik* tenzor, $\partial^2 E / (\partial k_i^2)$ kimi hədlər isə *diaqonal* elementləri adlanır. ℓ - tərtdən töremə 3^ℓ sayda elementdən ibarət ℓ -ranqlı tenzor əmələ gətirir.

\vec{k}_0 -in kiçik ətrafına baxaq. Bu halda birinci hədlərlə kifayətlənmək olar. Ekstremumluq şərtinə görə $\left. \frac{dE}{d\vec{k}} \right|_{\vec{k}_0} = 0$ olduğundan sıra kvadratik hədlərdən başlayır.

$$E(\vec{k}) = E_0 + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \dots = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) + \dots \quad (2.6.7)$$

Buradan görünür ki, ekstremumun yaxınlığında izoenergetik səth kifayət qədər dəqiqliklə ikinci tərtibli səthlə təsvir olunur. Enerjinin qiyməti E_0 - ekstremal qiymətə yaxın olduqca, bu şərt daha dəqiq ödənilir. Atılan hədlərin birincilərə nəzərən çox kiçikliyi buna əsas verir:

$$\frac{1}{6} \frac{d^3 E}{d\vec{k}^3} (\vec{k} - \vec{k}_0)^3 \ll \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \quad (2.6.8)$$

Koordinat oxlarını seçməklə ikinci ranqlı tenzoru diaqonal şəkə gətirmək olar, belə ki, qeyri diaqonal elementlər bu oxlar üzrə sıfır çevrilir. Bu şərt daxilində

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} = 0, \quad (i \neq j) \quad (2.6.9)$$

Bu halda izoenergetik səthlərin tənlikləri

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 E}{\partial k_i^2} (k_i - k_{0i})^2 = \text{const} = E \quad (2.6.10)$$

və ya

$$E(\vec{k}) - E_0 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} (k_x - k_{0x})^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} (k_y - k_{0y})^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} (k_z - k_{0z})^2 = \text{const}, \quad (2.6.11)$$

şəklinə düşür.

Sıraya ayrılma ekstremal nöqtəyə nəzərən aparıldığından, bütün töremələrdə işarələr eynidir— minimumda plus, maksimumda isə minus, ona görə izoenergetik səthlər *ellipsoid* şəklindədir.

İzoenergetik səthlərə kvaziimpuls fəzasında baxaq.

Aydındır ki,

$$E(\vec{p}) = E(\vec{p}_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d\vec{p}^2} (\vec{p} - \vec{p}_0)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 E}{d\vec{p}^3} (\vec{p} - \vec{p}_0)^3 + \dots \quad (2.6.12)$$

$\vec{p}_0 = \hbar \vec{k}_0$ - ekstremum nöqtəsi olduğundan \vec{p}_0 -in yaxın ətrafı ilə kifayətlənərək,

$$E(\vec{p}) = E_0 + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d\vec{p}^2} (\vec{p} - \vec{p}_0)^2 + \dots \quad (2.6.13)$$

yaza bilərik

$$\frac{d^2 E}{d\vec{p}^2} = m^{*-1} \quad (2.6.14)$$

qəbul edək. Onda aydındır ki, m^{*-1} tenzorunun toplananları

$$m_{ij}^{*-1} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} \quad (2.6.15)$$

kimidir. m_{ij}^{*-1} -in ölçü vahidi kütlənin tərs qiymətinin ölçü vahidi ilə üst-üstə düşür:

$$[m_{ij}^*] = \left[\frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} \right]^{-1} = [M]$$

$m^{*-1} = \frac{d^2 E}{d\vec{p}^2}$ kəmiyyəti *tərs effektiv kütlə* tenzoru adlanır. Tərs effek-

tiv kütlə tenzorundan istifadə edərək, enerjinin ifadəsini aşağıdakı kimi yaza bilərik:

$$E(\bar{p}) = E_0 + \frac{1}{2m^*} (\bar{p} - \bar{p}_0)^2 \quad (2.6.16)$$

Bu $\bar{p} - \bar{p}_0$ impulsuna malik sərbəst zərrəciyin kinetik enerjisinin ifadəsinə bənzəyir.

Effektiv kütlənin işarəsinə nəzər salsaq, görərik: **effektiv kütlə enerjisinin minimumunda müsbət, maksimumunda isə mənfidir.** m^{*-1} -in ifadəsini ümumi halda yazaq:

$$m^{*-1} = \begin{pmatrix} m_{xx}^{-1} & m_{xy}^{-1} & m_{xz}^{-1} \\ m_{yx}^{-1} & m_{yy}^{-1} & m_{yz}^{-1} \\ m_{zx}^{-1} & m_{zy}^{-1} & m_{zz}^{-1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial p_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x \partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_x \partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_y \partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_y \partial p_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial p_z \partial p_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z \partial p_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial p_z^2} \end{bmatrix} \quad (2.6.17)$$

Əgər tenzor diaqonal şəkə gətirilərsə, onda

$$m^{*-1} = \frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} m_{xx}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz}^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{pmatrix}, \quad (2.6.18)$$

burada

$$m_i^{-1} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i^2} = m_{ii}^{-1} \quad (2.6.19)$$

Tərs effektiv kütlə tenzoruna tərs olan tenzor daxil edək:

$$\{m^{*-1}\}^{-1} = m^* \quad (2.6.20)$$

Bu effektiv kütlə tenzorunu. Onun komponentləri tərs effektiv kütlə tenzorunun komponentlərinin tərs qiymətlərinə bərabər olmur:

$$m_{ij}^* \neq 1 / \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} \quad (2.6.21)$$

Bu komponentlər

$$m^* m^{*-1} = m^{*-1} m^* = I \quad (2.6.22)$$

şərtindən tapılmalıdır. Burada I-vahid tenzordur.

İzoenergetik səth aşağıdakı tənliklə təsvir olunur:

$$E(p) = E_0 + \frac{(p_x - p_{0x})^2}{2m_1} + \frac{(p_y - p_{0y})^2}{2m_2} + \frac{(p_z - p_{0z})^2}{2m_3} = \text{const} \quad (2.6.23)$$

Yarımoxları a, b, c olan ellipsoidin kanonik tənliyini aşağıdakı kimi yazsaq

$$\frac{(p_x - p_{0x})^2}{a^2} + \frac{(p_y - p_{0y})^2}{b^2} + \frac{(p_z - p_{0z})^2}{c^2} = 1, \quad (2.6.24)$$

görürük ki, yarımoxlardan uzunluqları m_1 -lərin uyğun qiymətlərinin kvadrat kökləri ilə düz mütənasib olur:

$$a^2 = 2(E - E_0)m_1; \quad b^2 = 2(E - E_0)m_2; \quad c^2 = 2(E - E_0)m_3 \quad (2.6.25)$$

Effektiv kütlənin bütün üç elementi bərabər olan halda $m_1 = m_2 = m_3 = m^*$, effektiv kütlə tenzoru skalyara çevrilir (sıfır rənqli tenzor) və izoenergetik səthlər sferik formaya malik olurlar:

$$E = E_0 + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*} = \text{const} \quad (2.6.26)$$

Əgər tenzorun hər hansı iki elementi eyni olarsa, məsələn, $m_1 = m_2 \neq m_3$, onda

$$E = E_0 + \frac{(p_x - p_{0x})^2 + (p_y - p_{0y})^2}{2m_1} + \frac{(p_z - p_{0z})^2}{2m_3} = \text{const} \quad (2.6.27)$$

olur və izoenergetik səthlər p_z oxu ətrafında fırlanmadan alınan ellipsoid şəklinə düşür.

Əgər $m_1 < m_3$ olarsa, onda ellipsoid fırlanma oxu boyunca dartılmış, $m_1 > m_3$ olarsa isə fırlanma oxu boyunca sıxılmış olur və dartılma və sıxılma m_3/m_1 nisbəti ilə mütənasib olur.

§2.7. Sürətlə kvaziimpuls arasında əlaqə

Sürət operatoru \hat{v} Puassonun kvant mötərizələrinin köməyi ilə müəyyən edilir:

$$\hat{v} = \frac{d\hat{r}}{dt} = [\hat{H}, \hat{r}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{r}\hat{H} - \hat{H}\hat{r}), \quad (2.7.1)$$

burada \hat{r} -koordinat operatoru, \hat{H} -isə Hamilton operatorudur. \hat{r} və \hat{H} operatorlarını hesablamaq üçün E və ya \vec{k} -təsvirlərə keçmək daha əlverişlidir, belə ki, bütün operatorlar \vec{k} -dan asılı olan funksiyalar üzərindəki müəyyən əməliyyatlar şəklində verilir. \hat{H} -Hamilton operatoru \vec{k} və ya E təsvirlərdə ya **vurma operatoru**, ya da sadəcə $E(\vec{k})$ enerjisidir.

$$\hat{H}(\vec{k}) = E(\vec{k}) \quad (2.7.2)$$

$\hat{r}(\vec{k})$ operatorunu m0üeyyən etmək üçün $\psi_k(\vec{r})$ funksiyasının $\hat{r}(\vec{k})$ operatorunun məxsusi funksiyası olan $\psi_k(\vec{r})$ funksiyası ilə sıx əlaqədə olması şərtindən istifadə etmək olar:

$$\hat{r}(\vec{k})\psi_r(\vec{k}) = \vec{r}\psi_r(\vec{k}) \quad (2.7.3)$$

burada \vec{r} - koordinat operatorunun məxsusi qiyməti, $\psi_r(\vec{k})$ isə onun \vec{k} -təsvirdə verilmiş məxsusi funksiyasıdır.

Kvant mexanikəsindən məlum olduğu kimi, iki operatorun qarşılıqlı təsvirdə məxsusi funksiyaları sadə münasibətdədir: əgər \hat{L} -operatorunun məxsusi funksiyası M - təsvirdə $\psi_L(M)$:

$$\hat{L}(M)\psi_L(M) = L\psi_L(M), \quad (2.7.4)$$

\hat{M} -operatorunun L təsvirdə məxsusi funksiyası $\psi_M(L)$ isə

$$\hat{M}(L)\psi_M(L) = M\psi_M(L) \quad (2.7.5)$$

olarsa, onda

$$\psi_L(M) = \psi_M^*(L) \quad (2.7.6)$$

olar. Buna əsaslanaraq \vec{k} -təsvirdə $\hat{r}(\vec{k})$ - operatorunun məxsusi funksiyasını

$$\psi_r(\vec{k}) = \psi_k^*(\vec{r}) = e^{-i(\vec{k}\vec{r})}\varphi_k^*(\vec{r}) \quad (2.7.7)$$

kimi yazmaq olar ki, bundan sonra məxsusi funksiyalar və məxsusi qiymətlərə uyğun tənliklərə əsasən $\hat{r}(\vec{k})$ operatorunun şəklini asanlıqla təalərik:

$$\hat{r}(\vec{k})\psi_r(\vec{k}) = \vec{r}\psi_r(\vec{k}) \quad (2.7.8)$$

və ya

$$\hat{r}(\vec{k})\psi_k^*(\vec{r}) = \vec{r}\psi_k^*(\vec{r}) \quad (2.7.9)$$

Bu münasibətlərin mənası ondadır ki, $\hat{r}(\vec{k})$ operatorunun ehlə formasını seçmək lazımdır ki, onun $\psi_k^*(\vec{r})$ funksiyasına təsiri nəticəsində həmin funksiyanın \vec{r} -ə hasili alınsın. Bu zaman $\psi_k^*(\vec{r})$ funksiyasına \vec{k} -dəyişəninə görə təsir etmək lazımdır.

$\frac{d}{dk} = \nabla_{\vec{k}}$ operatorunun $\psi_k^*(\vec{r})$ funksiyasına təsirine baxaq:

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{k}}\psi_k^*(\vec{r}) &= \nabla_{\vec{k}} \left[e^{-i(\vec{k}\vec{r})}\varphi_k^*(\vec{r}) \right] = -i\vec{r}\psi_k^*(\vec{r}) + e^{-i(\vec{k}\vec{r})}\nabla_{\vec{k}}\varphi_k^*(\vec{r}) = \\ &= -i\vec{r}\psi_k^*(\vec{r}) + \psi_k^*(\vec{r}) \left[\nabla_{\vec{k}} \ln \varphi_k^*(\vec{r}) \right]. \end{aligned} \quad (2.7.10)$$

və ya

$$\bar{r} \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r}) = [i \nabla_{\bar{k}} - (i \nabla_{\bar{k}} \ln \varphi_{\bar{k}}^*)] \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r}) = \hat{r}(\bar{k}) \psi_{\bar{k}}^*(\bar{r}), \quad (2.7.11)$$

beləliklə,

$$\hat{r}(\bar{k}) = i \nabla_{\bar{k}} - i (\nabla_{\bar{k}} \ln \varphi_{\bar{k}}^*) \quad (2.7.12)$$

operatoru \bar{k} -dalğa ədədinə (və ya kvaziimpulsa) görə differensallama və \bar{k} (və ya \bar{r} -dən) asılı hər hansı funksiya hasildən ibarət cəm şəklində verilir. $-i(\nabla_{\bar{k}} \ln \varphi_{\bar{k}}^*)$ həddi əvəzinə $\nabla_{\bar{k}} \varphi_{\bar{k}}^*$ funksiyasını $\varphi_{\bar{k}}$ funksiyaları üzrə ayrılıb hər hansı $\hat{\Omega}$ operatoru daxil etmək olar.

$U(\bar{r})$ =sonst olduqda ikinci hədd sıfır çevrilir və $\hat{r}(\bar{k})$ operatoru \hat{p} -təsvirdə adi koordinat operatoruna çevrilir, belə ki, bu halda kvaziimpulsa impuls eyniləşir. İndi sürət operatorunun ifadəsini \bar{k} -təsvirdə

$$\hat{v}(\bar{k}) = \frac{1}{i\hbar} (\hat{r}(\bar{k}) E(\bar{k}) - E(\bar{k}) \hat{r}(\bar{k})) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\bar{k})}{d\bar{k}} \quad (2.7.13)$$

kimi yazmaq olar ki, bu da enerjinin kvaziimpulsa görə törəməsinə vurma operatoru şəklindədir:

$$\hat{v}(\bar{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(\bar{k})}{d\bar{k}} = \frac{dE}{d\bar{p}} = \hat{v}(\bar{p}) = \bar{v}. \quad (2.7.14)$$

Bu münasibət dalğa paketinin qrup sürəti üçün ifadəsinə bənzərdir:

$$\bar{v}_{gr} = \frac{dE}{d\bar{p}} \quad (2.7.15)$$

$E(\bar{k})$ enerjiyə malik haldakı (amma $\psi_{\bar{k}}^*(\bar{r})$ deyil, $\psi_{\bar{k}}(\bar{r})$ dalğa funksiyalı) elektronunun orta sürəti tamamilə müəyyən qiymətə malik olub, bu haldan asılıdır və

$$\langle \bar{v} \rangle = \bar{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\bar{k}} = \frac{dE}{d\bar{p}} \quad (2.7.16)$$

kimidir (burada $\langle \rangle$ -işarəsini atırıq).

Beləliklə, çox kiçik enerji intervalında müəyyən enerjili hallar üzrə elektronun sürətinin ortalaşmış qiyməti enerjinin kvaziimpulsa görə törəməsi şəklində müəyyən olunur. Ekstremum nöqtələrində kvantomexaniki mənada orta sürət sıfır bərabərdir (Bundan sonra «kvantomexaniki mənada orta sürət» sözlərini atacağıq).

Əgər ekstremal nöqtələrin yaxın ətrafına baxsaq, bu intervalda enerji kvaziimpulsun kvadratik funksiyası olduğundan:

$$E - E_0 = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} - \vec{p}_0)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(P_i - P_{0i})(P_i - P_{0i})}{m_{ij}}, \quad (2.7.17)$$

sürət

$$v_i = \frac{\partial E}{\partial P_i} = \sum_{j=1}^3 \frac{P_j - P_{0j}}{m_{ij}}, \quad (2.7.18)$$

və ya vektor şəklində

$$\vec{v} = \frac{1}{m^*} (\vec{p} - \vec{p}_0) \quad (2.7.19)$$

olar, başqa sözlə, ümumi halda **sürət kvaziimpulsun tərs effektiv kütlə tenzoruna skalyar hasilinə** bərabərdir. Əgər m^{*-1} tenzoru diaqonal şəklindədirsə,

$$\{m^{*-1}\}_{ij} = m_i^{-1} \delta_{ij} \quad (2.7.20)$$

onda (2.7.18) ifadəsi sadələşir:

$$v_i = \frac{P_i - P_{0i}}{m_i}. \quad (2.7.21)$$

Sürət kvaziimpuls fəzasında enerji qradienti olduğundan, o, izoenergetik səthlərdə $\vec{p} - \vec{p}_0$ - radius-vektorlu bütün nöqtələrdə səthin normalı üzrə yönəlir.

Ellipsoidal izoenergetik səthlərdə radius-vektor və səthin normalı kollinear olmadığından, sürət və kvaziimpulsun istiqamətləri üst-üstə düşür. Kollinearlıq şərti belə səthlər üçün yalnız ellipsoidlərin oxları boyunca ödəniləcək (şək. 2.1), bu halda

$$P_i = P_{0i} = \sqrt{2m_i(E - E_0)} \quad (2.7.22)$$

olduğundan

$$v_i = \frac{\sqrt{2(E - E_0)}}{\sqrt{m_i}} \quad (2.7.23)$$

alırıq.

Beləliklə, **enerjinin eyni bir qiymətində ellipsoidin oxları boyunca sürət effektiv kütlənin uyğun komponentinin kvadrat kökü ilə tərs mütənəsb olur.** Ellipsoidlərin

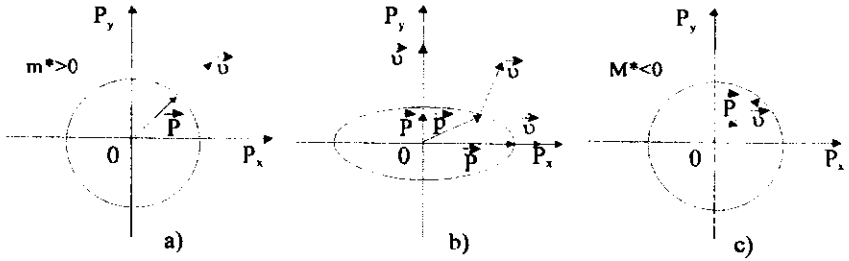
$$a_i = \sqrt{2m_i(E - E_0)} \quad (2.7.24)$$

oxlarını daxil edərək sürət üçün

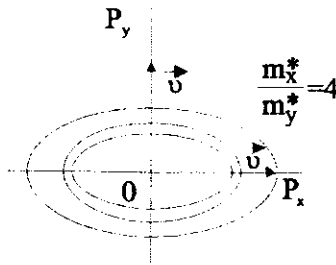
$$v_i = \frac{a_i}{m_i} = \frac{\sqrt{2(E - E_0)}}{\sqrt{m_i}} \quad (2.7.25)$$

ifadələrini alırıq. Buradan görünür ki, ellipsoid nə qədər çox dartılmış olarsa, həmin istiqamət üzrə sürət daha kiçik olur. Əgər izoenergetik enerji səviyyələri ailəsini qursaq bu daha əyani nəzərə çarpar (şək. 2.2). Effektiv kütlə kiçik olduqca, bu istiqamət üzrə izoenergetik səthlər daha sıx yerləşir və buna uyğun olaraq həmin ox üzrə sürət daha böyük olur.

Effektiv kütlənin işarəsi ilə əlaqədar mühüm bir anı xüsusi qeyd etmək lazım gəlir. Sadəlik üçün fərz edək ki, effektiv kütlə skalyar kəmiyyətdir. Bu halda \vec{u} və $(\vec{P} - \vec{P}_0)$ vektorları kolliniardırlar, amma onların istiqaməti ekstremumun şəkilindən asılıdır. Minimum üçün $m^* > 0$ və \vec{u} sürəti $(\vec{P} - \vec{P}_0)$ istiqaməti ilə üst-üstə düşür. Enerjinin maksimumu üçün isə $m^* < 0$ olur və bu halda \vec{u} sürət vektoru $(\vec{P} - \vec{P}_0)$ kvaziimpuls vektorunun əksinə yönəlir (şək. 2.1c).



Şək. 2.1 Radius-vektor və izoenergetik səthin normalının istiqamətləri:
a- sferik izoenergetik səth; b- ellipsoidal izoenergetik səth;
c- sferik izoenergetik səth, $m^* < 0$.



Şək. 2.2. Sürətlə effektiv kütlə və izoenergetik səthlərin sıxlığı arasında əlaqə

§2.8 Təcil operatoru

Təcil operatoru \hat{a} , sürət operatorunun zamana görə törəməsi kimi təyin olunur.

$$\hat{a} = \frac{d\hat{v}}{dt} = [\hat{H}, \hat{v}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{v}\hat{H} - \hat{H}\hat{v}) \quad (2.8.1)$$

Elektronun qəfəsin periodik sahəsində hərəkəti zamanı, aydındır ki, $\hat{a}=0$ olur, çünki \bar{k} -təsvirdə

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) \text{ və } \hat{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\mathbf{k}}$$

olduğundan,

$$\hat{v}\hat{H} - \hat{H}\hat{v} = 0 \quad (2.8.2)$$

alınır. İki operatorun kommutatoru təsvirin şəkildən asılı olmadığından $\hat{a} = 0$ və

$$\langle \hat{a} \rangle = \langle \bar{a} \rangle = 0, \quad (2.8.3)$$

olur. Bu isə o deməkdir ki, **elektron kristal qəfəsin periodik sahəsində təcilsiz hərəkət edir.** İlk baxışdan elə görünə bilər ki, periodik sahədə elektronun sürəti də periodik təkrarlanır, amma bunun əsası yoxdur. Buna səbəb elektrona (korpuskulyarla yanası) dalğa təbiətinin də xas olmasıdır. Bu isə **elektronun orta sürətinin hərəkət integralı olmasına** (sərbəst hərəkət edən zərrəciyin sürətinin saxlanması kimi) gətirib çıxarır.

Yada salmaq ki, bununla bərabər enerji və kvaziimpuls da zamana görə saxlanılır. Zərrəciyin impulsu isə

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\nabla U(\vec{r}) = \vec{F}_i \quad (2.8.4)$$

kimi periodik dəyişir, belə ki, kristal qəfəs tərəfindən elektrona təsir edən \vec{F}_i qüvvəsi qəfəs perioduna malikdir

$$\vec{F}_i(\vec{r} + \vec{n}) = \vec{F}_i(\vec{r}) \quad (2.8.5)$$

Fərz edək ki, kristala $V(\vec{r})$ potensial enerjili hər hansı kənar sahə əlavə olunmuşdur. Bu halda, bildiyimiz kimi, kvaziimpuls $V(\vec{r} + \vec{n}) \neq V(\vec{r})$ olarsa, başqa sözlə, əlavə sahə periodik olmazsa,

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_a = -\nabla V(\vec{r}) \quad (2.8.6)$$

kimi dəyişməyə başlayar.

Kvaziimpuls periodik sahənin istənilən pozuntusu ilə əlaqədar meydana çıxan kənar \vec{F}_a qüvvəsinin təsiri altında dəyişir.

\vec{k} - (və ya \vec{P}) -fəzada halı təvir edən nöqtə

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}_a \quad (2.8.7)$$

tənliyinə müvafiq yerdəyişməyə başlayır. Bu tənlikdən

$$\vec{P}(t) = \vec{P}_0 + \int \vec{F}_a(\xi) d\xi \quad (2.8.8)$$

alınır. Əgər xarici qüvvə zamandan asılı⁰ olmazsa,

$$\vec{P}(t) = \vec{P}_0 + \vec{F}_a(t) \quad (2.8.9)$$

olar. Zərrəciyin trayektoriyası \vec{P} -fəzada xarici \vec{F}_a qüvvəsinin istiqaməti ilə verilən düz xətt olur. Amma əgər zərrəcik kvaziimpuls fəzasında hərəkət etməyə başlasa, onda o, bir enerji səviyyəsindən digərinə keçir. Başqa sözlə \vec{F}_a - xarici qüvvəsi yalnız kvaziimpulsu deyil, həmçinin zərrəciyin enerjisini də dəyişir. Enerjinin dəyişməsini Şredinger tənliyinin həlli ilə müəyyən etmək olar.

Kristala xarici $V(\vec{r})$ potensial sahəsi əlavə olunan hal üçün Puasson mötərizəsini hesablayaq. Qəfəsin hamiltonianını \hat{H}_0 ilə işarə etsək:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}), \quad (2.8.10)$$

tam hamiltonian üçün

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) + V(\vec{r}) = \hat{H}_0 + V(\vec{r}) \quad (2.8.11)$$

ifadəsini alırıq.

\hat{v} -sürət operatoru \hat{H}_0 -la kommutasiya etdiyindən, təcil operatoru üçün alırıq:

$$\hat{a} = \frac{d\hat{v}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \hat{v}(\hat{H}_0 + \hat{V}) - (\hat{H}_0 + \hat{V})\hat{v} \right\} = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \hat{v}\hat{V} - \hat{V}\hat{v} \right\}. \quad (2.8.12)$$

Təcil operatorunun \vec{k} -təsvirdə vermək daha rahatdır.

$$\hat{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (2.8.13)$$

olduğunu nəzərə alsaq, yaza bilərik:

$$\hat{a}(\vec{k}) = \frac{1}{i\hbar^2} \left\{ \frac{dE}{dk} \hat{v}(\vec{k}) - \hat{v}(\vec{k}) \frac{dE}{dk} \right\}. \quad (2.8.14)$$

Bu ifadədən $\hat{a}(\vec{k})$ -nı hesablamaq üçün potensial enerjini \vec{k} -təsvirdə

vermək lazımdır. Bunun üçün $V(\vec{r})$ kimi koordinatdan asılı şəkildə verilən potensial enerjini \vec{k} -təsvirə keçirmək lazımdır, daha doğrusu, \vec{r} -in yerinə

$$\hat{r}(\vec{k}) = i\nabla_{\vec{k}} - i(\nabla_{\vec{k}} \ln \phi_{\vec{k}}^*) \quad (2.8.15)$$

operatorunu qoymaq lazımdır.

Daha mühüm praktiki əhəmiyyət kəsb edən bircins qüvvə sahəsinə baxaq:

$$V(\vec{r}) = -(\vec{F}_a \vec{r}). \quad (...16)$$

\vec{k} təsvirdə o, \vec{k} üzrə differensiaslama operatoru ilə vurma operatorunun cəmi şəklində olur:

$$\hat{V}(\vec{k}) = -(\vec{F}_a \nabla_{\vec{k}}) + i(\vec{F}_a \nabla_{\vec{k}} \ln \phi_{\vec{k}}^*) \quad (2.8.17)$$

Bu ifadədə ikinci hədd $\frac{dE}{\hbar dk}$ ilə kommutasiya etdiyindən,

$$\hat{a}(\vec{k}) = -\frac{i}{\hbar^2} \left\{ \frac{dE}{dk} (-i\vec{F}_a \nabla_{\vec{k}}) + (i\vec{F}_a \nabla_{\vec{k}}) \frac{dE}{dk} \right\} = \frac{1}{\hbar^2} (\vec{F}_a \nabla_{\vec{k}}^2 E) = \frac{\vec{F}_a}{m^*} \quad (2.8.18)$$

alırıq.

$$\frac{1}{m^*} = \frac{d^2 E}{d\vec{p}^2} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} \quad (2.8.19)$$

kəmiyyəti, enerjinin kvaziimpulsdan kvadratik asılı olduğu halda əvvəlcə daxil etdiyimiz m^{*-1} tenzoru ilə üst-üstə düşən ümumiləşmiş tərs effektiv kütlə tenzoru kimi baxıla bilər.

Sonuncu münasibəti nəzərə alaraq, təcil operatorunu

$$\hat{a}(\vec{k}) = \frac{\vec{F}_a}{m^*(\vec{k})} \quad (2.8.20)$$

kimi yaza bilərik.

\vec{F}_a \vec{k} -dan asılı olmadığından, \vec{k} -dan asılı olmayan effektiv kütlə halında təcil operatoru \hat{a} istənilən təsvirdə eyni ifadəli olur:

$$\hat{a} = \frac{\vec{F}_a}{m^*}; \quad \vec{a} = \frac{\vec{F}_a}{m^*} \quad (2.8.21)$$

və ya

$$m^* \hat{a} = \vec{F}_a; \quad m^* \vec{a} = \vec{F}_a. \quad (2.8.22)$$

Aldığımız bu iki tənlik formaca Nyutonun hərəkət tənliyi ilə üst-

üstə düşür. Amma bu tənliklərin bir sıra fərqləndirici xüsusiyyətlərini qeyd etmək lazım gəlir.

Birinci, ümumi halda m^* ikinci rəngli tenzordur, ona görə də təcil vektoru qüvvə vektoru ilə üst-üstə düşmür. (2.8.21) tənliyi, məsələn, a_x komponenti üçün aşağıdakı şəkildədir

$$a_x = \frac{1}{m_{xx}} F_x + \frac{1}{m_{yy}} F_y + \frac{1}{m_{zz}} F_z = \sum_{j=1}^3 \frac{F_j}{m_{xj}}. \quad (2.8.23)$$

Əgər m^{*-1} diaqonal şəkildədirsə, onda

$$a_j = \frac{F_j}{m_j} \quad (2.8.24)$$

olar. Bu tənlikdən görünür ki, qüvvə yalnız enerji ellipsoidlərinin oxlarından hər hansı biri istiqamətində yönəlmiş halda təcil və qüvvə vektorları kollinear olurlar.

İkinci, elektrona təcil yalnız xarici qüvvə tərəfindən verilir, daxili \vec{F}_i -qüvvələri isə elektrona heç bir təcil vermirlər.

Üçüncü, elektronun xarici qüvvənin təsirinə reaksiya verən dinamik xarakteristikası adı kütlə deyil, effektiv m^* kütləsidir. Bu o deməkdir ki, qəfəs sahəsi, elektrona təcil vermədiyinə baxmayaraq, o, xarici qüvvənin təsiri altında elektronun hərəkətinin dəyişməsinə təsir göstərir. Başqa sözlə, xarici qüvvələrin təsiri altında qəfəsin sahəsi özünü onda göstərir ki, elektronun dinamik xüsusiyyətləri adı kütlə ilə deyil, effektiv kütlə ilə müəyyən olunur.

Skalyar effektiv kütlə üçün \vec{a} və \vec{F} vektorları kollinearlıqlar. Amma qəfəsdəki elektronun sərbəst elektrondan fərqi yalnız effektiv kütlənin sərbəst zərrəciyin kütləsindən olan fərqi deyil. Zərrəcik enerjinin maksimumunun yaxın ətrafında olduğu halda onun effektiv kütləsi mənfi-dir ($m^* < 0$) və \vec{a} -təcil vektoru \vec{F}_a - xarici qüvvə vektorunun əksinə yönəlir.

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}_a}{m^*} = -\frac{\vec{F}_a}{|m^*|} \quad (2.8.25)$$

Bircinsli elektrik sahəsinin təsiri hesabına meydana çıxan qüvvəni nəzərdən keçirək:

$$\vec{F}_a = e_n \vec{E} \quad , \quad (2.8.26)$$

burada e_n - elektronun yüküdür ($e_n < 0$). Bu halda

$$\vec{a} = \frac{e_n}{m^*} \vec{E} = \frac{-|e_n|}{-|m^*|} \vec{E} = \frac{|e_n|}{|m^*|} \vec{E}. \quad (2.8.27)$$

Elektronun təcili bu halda onun müsbət yükə və müsbət effektiv kütləyə malik olduğu hala müvafiq olaraq, sahə istiqamətində yönəlir. Belə anomal təcil alan elektron kvantomexaniki deşik adlanır.

Əgər elektron enerji minimumunun yaxın ətrafında olarsa, $m^* > 0$ və təcil qüvvə istiqamətində, və deməli adi elektron üçün olduğu kimi, \vec{E} - elektrik sahəsinin əksinə yönəlir.

(2.8.22) ifadəsini (2.8.19) -dan almaq olar. Belə ki, (2.8.19)-u zamana görə differensiallasaq,

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{\vec{P} - \vec{P}_0}{m^*} = \frac{1}{m^*} \frac{d\vec{P}}{dt} = \frac{1}{m^*} \vec{F}_a = \vec{a} \quad (2.8.28)$$

alırıq. (2.8.28) ifadəsi (2.8.21)-lə üst-üstə düşür, amma o, (2.8.20)-ə nəzərən daha ümumdür. Belə ki, (2.8.21)-də \vec{F}_a -nın koordinatdan asılı olmadığı fərz olunduğu halda, (2.8.28)-də \vec{F}_a koordinatın funksiyası ola bilər. Digər tərəfdən (2.8.21)-də m^{*-1} ümumiləşmiş tərs effektiv kütlə tenzoru olduğu halda, (2.8.28)-də $m^{*-1} \vec{k}$ -dan asılı deyil. Başqa sözlə, (2.8.19) və ona müvafiq (2.8.28) ifadələri yalnız $\vec{P} - \vec{P}_0$ hallarının enerjinin kvaziimpulslardan kvadratik asılı olduğu oblastlarda doğrudur. Əgər $\vec{P} - \vec{P}_0$ halı enerjinin kvaziimpulsdan daha müəkkəb asılı olduğu oblasta doğru yerini dəyişərsə, onda (2.8.28) ifadəsinə m^{*-1} -in zamana görə törəməsini ələ etmək lazım gəlir.

Sonda stasionar halda $\psi_k(\vec{r})$. İmpulsun Blox funksiyası ilə təsvir olunan kvantomexaniki mənada orta qiyməti üçün yazıla bilər

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \psi_k^*(\vec{r}) \hat{p} \psi_k(\vec{r}) d\tau = m \int \psi_k^*(\vec{r}) \frac{\vec{P}}{m} \psi_k(\vec{r}) d\tau = m \langle \vec{v} \rangle. \quad (2.8.29)$$

Amma (2.8.16) və (2.8.17)-yə əsasən

$$\langle \vec{v} \rangle = \vec{v} = \frac{\vec{P} - \vec{P}_0}{m^*} \quad (2.8.30)$$

olduğundan

$$\langle \vec{p} \rangle = \frac{m}{m^*} (\vec{P} - \vec{P}_0); \quad \vec{P} - \vec{P}_0 \equiv \frac{m^*}{m} \langle \vec{p} \rangle, \quad (2.8.31)$$

və ya

$$P_i - P_{0i} = \frac{m_i}{m} \langle p_i \rangle \quad (2.8.32)$$

alırıq. Beləliklə, $\langle \vec{p} \rangle$ -ni kristal qəfəsdə elektronun «klassik» impulsu kimi qəbul edərək, kvaziimpulsu «klassik» impuls və effektiv kütlə vasitəsi ilə ifadə etmək olar.

İmpulsu $\langle \vec{p} \rangle$ olan sərbəst zərrəciyin kinetik enerjisini, orta impulsu sərbəst zərrəciyin malik olduğu impulsu bərabər kristal qəfəsdəki elektronun tam enerjisi ilə müqayisə edək:

$$T = \frac{\langle \vec{p} \rangle^2}{2m} = \frac{m\bar{v}^2}{2} = \frac{m}{2} \left[\frac{(\vec{p} - \vec{p}_0)}{m^*} \right]^2 \quad (2.8.33)$$

Skalyar effektiv kütlə üçün $m_1 = m^* \cdot v_0$ və

$$T = \frac{m}{m^*} \left[E(\vec{p}) - E(\vec{p}_0) \right] \quad (2.8.34)$$

alırıq.

§ 2.9. Kristalda elektronun dalğa vektorunun xassələri. Brillyüen zonaları

Şredinger tənliyinin Blox həllini araşdıraraq. Fərz edək ki, \vec{k}_1 və \vec{k}_2 iki zərrəciyin dalğa vektorlarıdır. Əgər bu zərrəciklər qarşılıqlı təsirdə olmasalar onda iki qarşılıqlı təsirdə olmayan zərrəciklər sistemi üçün dalğa funksiyası

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}) \cdot \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) \quad (2.9.1)$$

kimi olar. Translyasiya şərtini nəzərə alaraq

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) &= \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r} + \vec{n}) \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r} + \vec{n}) \\ e^{i\vec{k}\vec{n}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}_1\vec{n}} \psi_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_2\vec{n}} \psi_{\vec{k}_2} = e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{n}} \psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.9.2)$$

alırıq. (2.9.1)-i nəzərə alsaq, $e^{i\vec{k}\vec{n}} = e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{n}}$ olar. Bu şərt $\vec{k}\vec{n} = (\vec{k}_1 + \vec{k}_2)\vec{n} = 2\pi m$ ödənərsə doğrudur, burada m - istənilən tam ədəddir. Onda

$$\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + 2\pi\vec{b} \quad (2.9.3)$$

alırıq. Burada \vec{b} -tərs qəfəs vektoru adlanan hər hansı vektordur. Həqiqətən də $\vec{b}\vec{n} = m$. Burada yenə də $\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ - translyasiya vektoru, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ isə düz qəfəs ortlarıdır.

Beləliklə, (2.9.3) tənliyindən alınır ki, sərbəst elektronun dalğa vektorundan fərqli olaraq, elektronun kristaldakı dalğa vektoru *birqiymətli* deyil. Kubik kristal halında elektronun dalğa vektoru $2\pi\vec{b}$ və ya $\frac{2\pi}{a}$ (bu-

rada \vec{b} və \vec{a} uyğun olaraq tərs və düz qəfəs vektorlarıdır) toplananı dəqiq-
liyi ilə təyin olunur. Onda dalğa funksiyası üçün aşağıdakı münasibət
doğrudur:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}+2\pi\vec{b}}(\vec{r}) \quad (2.9.4)$$

Həqiqətən də $\vec{k}' = \vec{k} + 2\pi\vec{b}$ əvəzləməsi edərək $e^{2\pi i \vec{a}\vec{b}} = 1$ -ə gətirir və

$$e^{i\vec{k}'\vec{r}} = e^{i(\vec{k}+2\pi\vec{b},\vec{r})} = e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i2\pi\vec{b}\vec{r}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.9.5)$$

alırıq.

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ və $\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{b}}(\vec{r})$ halları ekvivalent olduqlarından onlara uyğun
enerjilər də bərabər olmalıdır:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + 2\pi\vec{b}) \quad (2.9.6)$$

və ya

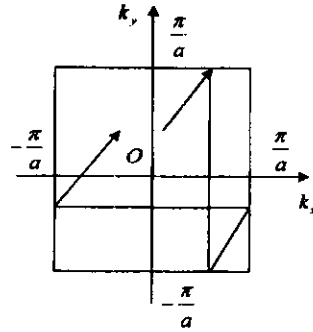
$$E(\vec{p}) = E(\vec{p} + 2\pi\vec{b}) \quad (2.9.7)$$

Buradan görünür ki, \vec{k} -fəzada elektronun dalğa funksiyası və enerjisi
 \vec{k} -dalğa vektorunun periodu $2\pi\vec{b}$ -yə bərabər periodik funksiyadır. Əgər \vec{k}
fəzada kristalın, məsafələri 2π dəfə uzadılmış tərs qəfəsini qursaq, onda
belə qəfəsin elementar yuvası dalğa funksiyasının tam dəyişmə periodunu,
başqa sözlə, elektronun kristalda bütün qeyri-ekvivalent hallarını əhatə
edər. \vec{k} -fəzada belə oblastlar **Brillyüen zonaları** adlanır. \vec{k} -fəzada
Brillyüen zonasına \vec{k} -nın koordinatları

$$-\pi b_i \leq k_i < \pi b_i \quad \text{və ya} \quad -\pi b_i < k_i \leq \pi b_i \quad (2.9.8)$$

şərtlərini ödəyən bütün halları düşür. Bu həcm \vec{k} -fəzasında birinci
Brillyüen zonasıdır. Aydındır ki, \vec{k} fəzasında $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyasının
qiymətlərinə görə bir-birinə ekvivalent sonsuz sayda Brillyüen zonaları
çoxluğu seçmək olar. \vec{k} -fəzasında elektronun bir-birindən $2\pi\vec{b}$ vektoru
qədər fərqlənən halları ekvivalent olduqlarından, lazımı sayda translyasiya
həyata keçirərək istənilən Brillyüen zonasının istənilən nöqtəsini, birinci
Brillyüen zonasının müəyyən nöqtəsinə gətirmək mümkündür. Beləliklə,
sonsuz \vec{k} -fəzasında elektronların bütün hallarını araşdırmaq əvəzi-
nə, birinci Brillyüen zonası daxilində bütün mümkün halları nəzər-
dən keçirmək kifayət edir. Bunun üçün Brillyüen zonasının sərhəddinin
hər hansı nöqtəsində yerləşən halı, zonanın əks tərəfindəki sərhəddin ek-
vivalent nöqtəsinə köçürmək lazımdır (Şək. 2.3-də göstərilən kimi). Gəti-
rilmiş Brillyüen zonasının simmetriyası kristalın tərs qəfəsinin simmetriya-
ası ilə müəyyən olunur.

Bu simmetriya elementləri eyni zamanda $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyasının
simmetriya elementlərini müəyyən edir. Ona görə də Brillyüen zonasının



Şəkil 2.3. Əsas Brilliyen zonası hüdudlarında elektronun hərəkəti

formasının analizi kristalda elektronun xassələrini araşdırmaq və onun üçün Şredinger tənliyini həll etmək üçün çox əhəmiyyətlidir.

(2.9.8) tənliyinin araşdırılması göstərir ki, icazəli zonada \bar{k} , N sayda qiymət ala bilər, belə ki, izolə edilmiş atomda hər bir cırlaşmamış enerji səviyyəsi kristalda N alt səviyyəyə parçalanaraq, enerji zonalarını əmələ gətirir.

Əgər izolə olunmuş atomda E səviyyəsi cırlaşmış olarsa, onda atomda səviyyələri eyni olan bir neçə elektron mövcud olur. Belə halda kristalda cırlaşma qismən və ya tamamilə aradan qalxa bilər. Bu zaman atom səviyyəsi cırlaşmanın dərəcəsinə müvafiq bir neçə zonaya parçalanır. Cırlaşmış səviyyədən gN sayda alt səviyyədən ibarət (g - cırlaşmanın dərəcəsidir) cırlaşmış zona yarana bilər.

Kristalların növündən asılı olaraq Brilliyen zonalarının formaları çox müxtəlif ola bilər. Sadə kubik qəfəs üçün birinci Brilliyen zonası həcmi $V = (2\pi\hbar/a)^3 = h^3/a^3$ olan kub şəklindədir.

İdeal sonsuz kristalın gətirilmiş Brilliyen zonası selt spektrin sonsuz hallar çoxluğunu özündə cəmləşdirir. Lakin praktikada öyrənilən real kristallar həmişə məhdud ölçülərə malikdir.

Göstərmək olar ki, sonsuz kristal qəfəs üçün alınmış Blox dalğa funksiyalarını məhdud kristallar üçün də tətbiq etmək olar. Bu zaman elektronun hallar spektri diskret olur və Brilliyen zonasında qeyri-ekvivalent halların tam sayı məhdud kristaldakı atomların N sayına bərabər olur.

Brilliyen zonasında hallar sayını hesablamaq üçün sonsuz ideal kristaldan məhdud kristala keçərkən sərhəd şərtlərini nəzərə almaq lazım gəlir. Bunun üçün mümkün üsullardan biri *tsiklik sərhəd şərti* və ya *Born-*

Karman şərtidir ki, bunun da fiziki əsasında kristalda elektronun xassələrinin periodikliyi durur. Fərz edək ki, kristal tilləri L_1, L_2, L_3 olan hər hansı paralelepiped şəklindədir. Onda sonsuz fəzanı belə kristallarla dolduraq və $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyasının sonsuz kristalda periodikliyini nəzərə alaraq, aşağıdakı münasibəti yazı bilərik:

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(x + L_1, y, z) &= \psi_{\vec{k}}(x, y + L_2, z) = \\ &= \psi_{\vec{k}}(x, y, z + L_3) = \psi_{\vec{k}}(x + L_1, y + L_2, z + L_3)\end{aligned}\quad (2.9.9)$$

və ya dalğa funksiyasının translyasiya xassəsindən

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(x + L_1, y + L_2, z + L_3) &= e^{i[k_x(x+L_1)+k_y(y+L_2)+k_z(z+L_3)]} \times \\ &\times \psi_{\vec{k}}(x + L_1, y + L_2, z + L_3)\end{aligned}\quad (2.9.10)$$

alırıq. Bu tənliklər faktiki olaraq belə qənaətə gəlməyə əsas verir ki, seçilmiş paralelepipedlər çoxluğundan ibarət fəzanın periodikliyi nəticəsində, adi sərhəd şərtləri, dalğa funksiyasının x, y, z və $x+L_1, y+L_2, z+L_3$ koordinatlarında ekvivalentliyi ilə əvəz oluna bilər. Sonuncu tənliyin şəklini dəyişək:

$$\begin{aligned}\psi_{\vec{k}}(x + L_1, y + L_2, z + L_3) &= e^{i[k_x(x+L_1)+k_y(y+L_2)+k_z(z+L_3)]} \times \\ &\times \psi_{\vec{k}}(x + L_1, y + L_2, z + L_3) = \psi_{\vec{k}}(x, y, z) e^{i(k_x L_1 + k_y L_2 + k_z L_3)} e^{i\vec{k}\vec{r}} = \psi_{\vec{k}}(x, y, z).\end{aligned}\quad (2.9.11)$$

$\psi_{\vec{k}}(x + L_1, y + L_2, z + L_3) = \psi_{\vec{k}}(x, y, z)$ şərti, $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ funksiyasının düz qəfəsin perioduna bərabər periodikliyə malik olmasından ödənilir, belə ki, aydındır ki, L_1, L_2 və L_3 kəmiyyətləri tam sayda qəfəs sabitləri misillərinə bərabərdir. Onda sonuncu tənlikdən

$$e^{i(k_x L_1 + k_y L_2 + k_z L_3)} = 1 \quad (2.9.12)$$

şərti alınır ki, bu da öz növbəsində

$$e^{ik_x L_1} = e^{ik_y L_2} = e^{ik_z L_3} = 1 \quad (2.9.13)$$

deməkdir. (2.9.12) və (2.9.13) bərabərlikləri

$$k_x L_1 = 2\pi m_1; k_y L_2 = 2\pi m_2; k_z L_3 = 2\pi m_3 \quad (2.9.14)$$

şərtləri daxilində ödənilir, burada m_1, m_2, m_3 — ixtiyari tam ədədlərdir. Buradan alırıq ki, məhdud kristal üçün elektronun dalğa vektorunun qiymətləri

$$k_1 = \frac{2\pi m_1}{L_1}; k_2 = \frac{2\pi m_2}{L_2}; k_3 = \frac{2\pi m_3}{L_3} \quad (2.9.15)$$

kimi təyin olunan hallar icazəlidir. Ümumi şəkildə icazəli hallar üçün dalğa vektorunun qiymətləri

$$k_i = \frac{2\pi m_i}{L_i}; m_i = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \quad (2.9.16)$$

kimidir. Beləliklə, kristalın məhdudluğu, dalğa vektorunun diskretliyini şərtləndirir bu da öz növbəsində kristal daxilində elektronun enerjisinin diskretliyi: $E = E(\vec{k})$ – nəticəsini verir.

$L_i - m_i a_i$ – qəfəsin periodları və N_i – atomlar sayından asılı olaraq təyin edək: $L_i = a_i N_i$ olarsa, (7.17)-dən

$$k_i = \frac{2\pi m_i}{a_i N_i} = \frac{2\pi b_i m_i}{N_i}$$

olar, çünki kubik qəfəs üçün $1/a_i = b_i$.

\vec{k} və $\vec{k}' = \vec{k} + 2\pi\vec{b}$ hallarında dalğa funksiyasının xassələrinin ekvivalentliyindən m_i -nin sonsuz sayda deyil,

$$m_i = 0, \pm 1; \pm 2, \dots, \pm \left(\frac{N_i}{2} - 1 \right); \pm \frac{N_i}{2},$$

intervallarındakı qiymətləri ilə kifayətlənə bilərik. Onda minimum halların m_i sayı atomların N_i sayı ilə müəyyən olunur. Dalğa vektorunun $\vec{k} = 0$ qiymətlərinə nisbətən simmetrik qiymətlər seçərək,

$$-\frac{\pi}{a_i} \leq k_i < \frac{\pi}{a_i} \quad \text{və ya} \quad -\frac{\pi}{a_i} < k_i \leq \frac{\pi}{a_i},$$

eləcə də

$$-\pi b_i \leq k_i < \pi b_i \quad \text{və ya} \quad -\pi b_i < k_i \leq \pi b_i$$

kimi intervallar alırıq ki, bu da birinci Brilliyüen zonasına uyğun gəlir.

Beləliklə, Brilliyüen zonasında halların tam sayı $N_1 N_2 N_3 = N$ – kristal atomların sayına bərabər olur. Pauli prinsipini nəzərə alaraq \vec{k} – dalğa vektorunun hər bir qiymətinə uyğun enerji səviyyəsində ikidən çox olmamaqla elektron yerləşə bildiyindən, hər bir Brilliyüen zonasına $2N$ – hal düşür.

Real kristalların onların elementar qəfəslərinə nəzərən çox – çox böyük olduğunu nəzərə alsaq, n – in çox böyük olduğu görünür. Buna müvafiq olaraq, Brilliyüen zonasında diskret halların sayı $2N$ – ə bərabər olduğundan, enerji səviyyələri çox sıx yerləşirlər və ona görə də enerji spektrini və dispersiya qanununu kvazikəsilməz hesab etmək olar.

Elektronun kristal daxilində enerjisi periodiklik $E(\vec{k}) = E(\vec{k} + 2\pi\vec{b})$ xassəsi ilə yanaşı, $E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$ – cütlük xassəsini də ödəyir.

Əgər $E(\vec{k})$ dispersiya qanununa dalğa vektoru $\{k_x, k_y, k_z\}$ fəzasında baxsaq, onda $E(\vec{k}) = \text{const}$ tənliyi bu fəzada izoenergetik səthləri təyin edir. İzoenergetik səthlərin forması elektronun kristalda enerji spektrindən

asılı olub, metal və yarımkəçirici materiallarda bir çox fiziki xassələri müəyyən edir.

§ 2.10. Qutuda normalaşma və kvazi impulsun diskretliyi

Kvant mexanikasında aparılan bütün hesablamalarda adətən qəbul edilir ki, dalğa funksiyası normalaşmışdır.

Operatorların məxsusi funksiyalarının normalaşması onun məxsusi qiymətlər spektrinin mənzərəsindən asılı olaraq müxtəlif cür aparılır. Diskret spektr üçün dalğa funksiyaları vahidə normalaşır:

$$\int \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d\tau = \delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m \text{ olduqda,} \\ 0, & n \neq m \text{ olduqda.} \end{cases} \quad (2.10.1)$$

Burada $\psi_n(\vec{r})$, $\psi_m(\vec{r})$ hər hansı \hat{M} operatorunun M_n və M_m məxsusi qiymətinə müvafiq \vec{r} -təsvirdə məxsusi funksiyalarıdır:

$$\hat{M} \psi_n(\vec{r}) = M_n \psi_n(\vec{r}); \quad \hat{M} \psi_m(\vec{r}) = M_m \psi_m(\vec{r}) \quad (2.10.2)$$

Əgər \hat{M} operatoru kəsilməz məxsusi qiymətlər spektrinə malikdirsə

$$\hat{M} \psi_n(\vec{r}) = M \psi_n(\vec{r}); \quad \hat{M} \psi_m(\vec{r}) = M' \psi_m(\vec{r}), \quad (2.10.3)$$

Onda məxsusi funksiyalar Diran δ -funksiyasına normalaşır:

$$\int \psi_n^*(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d\tau = \delta(M - M'), \quad (2.10.4)$$

burada Diran δ -funksiyası aşağıdakı məlum münasibətləri ödəyir:

$$\delta(x - a) = \begin{cases} 0, & x \neq a \text{ olduqda,} \\ \infty, & x = a \text{ olduqda.} \end{cases}$$

$$\int_b^c \delta(x - a) dx = \begin{cases} 1, & a \in [b, c] \text{ olduqda,} \\ 0, & a \notin [b, c] \text{ olduqda.} \end{cases} \quad (2.10.5)$$

Normalaşmada inteqrallama zərəcəyin olduğu bütün həcm üzrə aparılır.

Real şəraitdə zərəciklər fəzanın məhdud oblastında, məsələn, məhdud ölçülü kristalda hərəkət edirlər. Bu halda Şredinger tənliyini məhdud ölçülü kristal üçün həll etmək tələb olunur və bu zaman sərhəd şərtlərini, daha doğrusu, dalğa funksiyası və onun törəmələri üçün qiymətləri kristalın sərhədlərinə müvafiq koordinatlar üzrə bilmək lazım gəlir. Bu zaman kristalın səthi ilə əlaqədar daha böyük çətinliklər meydana çıxır və bütün bunlar kristalın sahənin translyasiya simmetriyasının pozulmasına və s. səbəb olur. Eyni zamanda aydındır ki, əgər kristalın ölçüləri kifayət qədər böyük olarsa, səth hadisələri kristalın həcmində baş ve-

rən hadisələrə elə ciddi təsir göstərə bilməz və bu **tsiklik sərhəd şərtləri** daxil etməyə imkan verir. Fərz edək ki, kristal tərəfləri L_1, L_2, L_3 həcmi $G = L_1 L_2 L_3$ olan paralelepiped şəklindədir. Fərz edək ki, bütün fəza oxşar paralelepipedlərlə doludur. Bu halda kristalın sahəsinin translyasiya xassəsi bütün fəza üzrə saxlanılır. L_1, L_2, L_3 tam ədədləri ilə fərqlənən bütün nöqtələr ekvivalent olduğundan, sözün adi mənasında sərhəd şərtləri x və $x + L_1$ və digər analogi nöqtələrdə kristalın fiziki xassələrin ekvivalentliyi ilə əvəz olunur, ona görə də adi sərhəd şərtləri əvəzinə

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L_1, y, z) = \psi(x, y + L_2, z) = \psi(x, y, z + L_3) \quad (2.10.6)$$

şəklində tsiklik sərhəd şərtləri verilir.

Bu halda elektronun hərəkətinə əsas G oblastında baxmaq kifayət edir, ona görə də normalaşmanı G oblastı üzrə aparmaq olar:

$$\int_G \psi_M^*(\vec{r}) \psi_M(\vec{r}) d\tau = 1. \quad (2.10.7)$$

«Qutuda normalaşma» adlanan bu ifadə M kəmiyyətinin spektrinin müəyyən dəyişməsinə gətirib çıxarır. Göründüyü kimi kvaziimpuls həqiqi kəmiyyət olmalıdır. Bu zaman o, kəsilməz ola bilər, onda onun məxsusi funksiyaları, daha doğrusu Blox funksiyaları, δ -funksiyaya normalaşma-ldır:

$$\int \psi_k(\vec{r}) \psi_{k'}^*(\vec{r}) d\tau = \delta(\vec{k} - \vec{k}'). \quad (2.10.8)$$

Bu zaman inteqral bütün fəza üzrə hesablanır. Qutuda normalaşma apararaq

$$\int \psi_{k'}^*(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) d\tau = \delta_{kk'} = \begin{cases} 1, & \vec{k} = \vec{k}' \text{ olduqda,} \\ 0, & \vec{k} \neq \vec{k}' \text{ olduqda.} \end{cases} \quad (2.10.9)$$

yaza bilərik.

Başqa sözlə, belə yazılış diskret spektrli operator funksiyasının normalaşma şərtidir. Amma spektrin diskretliyi tsiklik sərhəd şərtlərindən bir-başa alınır:

$$\begin{aligned} \psi_k(x + L_1, y, z) &= e^{i(k_1(x+L_1) + k_2 y + k_3 z)} \varphi_k(x + L_1, y, z) = \\ &= e^{i k_1 L_1} e^{i(\vec{k}\vec{r})} \varphi_k(x, y, z) = e^{i(\vec{k}\vec{r})} \varphi_k(\vec{r}). \end{aligned} \quad (2.10.10)$$

L_1, L_2, L_3 kəmiyyətləri tam sayda qəfəs periodlarından ibarət olduğundan $\varphi_k(x + L_1, y, z) = \varphi_k(x, y, z)$ şərti avtomatik ödənilir, $\varphi_k(\vec{r})$ isə düz qəfəs periodu ilə periodikdir. Axırını bərabərlikdən

$$e^{i k_1 L_1} = 1 \quad (2.10.11)$$

alınır. Bu o zaman mümkündür ki, eksponentin xəyali üstü 2π -nin tam misillərinə bərabər olsun:

$$k_x L_1 = 2\pi n_1, \quad (2.10.12)$$

burada n_1 - ixtiyari tam ədəddir. Buradan da dalğa vektorunun diskretliyi alınır:

$$k_x = \frac{e\pi}{L_1} n_1; \quad n_1 = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \quad (2.10.13)$$

Analoji qaydada y və z oxları üzrə də periodiklik şərtini alırıq:

$$k_y = \frac{2\pi}{L_2} n_2; \quad n_2 = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \quad (2.10.14)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{L_3} n_3; \quad n_3 = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$$

L_i -i kristalın tili üzərində yerləşən N_i düyünlər sayı vasitəsi ilə təyin edək:

$$L_i = N_i a_i \quad (i=1,2,3) \quad (2.10.15)$$

Bunu k_i ifadəsində yerinə yazsaq:

$$k_i = \frac{2\pi}{a_i} \frac{n_i}{N_i} = 2\pi b_i \frac{n_i}{N_i} \quad (2.10.16)$$

alırıq. Nəzərə alsaq ki, \vec{k} və $\vec{k}' = \vec{k} + 2\pi\vec{b}$ dalğa vektorlarına uyğun hallar ekvivalentdir, onda biz n_i -nin yuxarı qiymətini

$$k_i = 2\pi b_i; \quad n_i = N_i, \quad (2.10.17)$$

aşağı qiymətini isə $n_i = 0$ şərtləri ilə məhdudlaşdırıla bilərik. $n_i / N_i = \pm 1/2$ kimi də digər şərt seçmək olar ki, bu da $\vec{k} = 0$ -a nisbətən simmetrik qiymətlər intervalını verir:

$$|k_i| \leq \frac{1}{2} 2\pi b_i = \frac{\pi}{a_i} \quad (2.10.18)$$

və ya

$$-\frac{\pi}{a_i} \leq k_i < \frac{\pi}{a_i}; \quad n_i = 0; \pm 1; \pm 2; \dots; \pm \frac{N_i - 1}{2}; \pm \frac{N_i}{2} \quad (2.10.19)$$

Beləliklə alınır ki, məhdud kristal üçün dalğa vektoru diskretidir. Amma kifayət qədər böyük ölçülü kristallar üçün bu əhəmiyyətli rol oynamır və biz adətən belə hallarda dalğa vektoruna kvazikəsilməz kəmiyyət kimi baxırıq, bəzi hallarda isə diskretliyi nəzərə almaq lazım gəlir. Kvaziimpuls diskret olduğundan, enerjinin də diskret olduğunu alırıq: $E(\vec{k}_i)$.

Amma zona daxilində enerji səviyyələri arasındakı fərq kT -dən çox kiçik olduğundan enerjini belə diskretliyinə uyğun hallarda nəzərə almayacağıq.

Dalğa funksiyasının «qutuda» normalaşma şərtinə qayıdaq. (2.10.9) ifadəsini Blox funksiyasında yerinə yazsaq

$$\int e^{-i(\vec{k}\vec{r})} \psi_i^*(\vec{r}) e^{i(\vec{k}\vec{r})} \varphi_i(\vec{r}) d\tau = \delta_{ii}, \quad (2.10.20)$$

$\vec{k} = \vec{k}'$ olduqda

$$\int \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) d\tau = 1 \quad (2.10.21)$$

alırıq. Buradan alınır ki, G oblastı üzrə $|\varphi_i(\vec{r})|^2$ -nin inteqralı vahidə bərabər olmalıdır. $\varphi_i(\vec{r})$ -ə daxil olan multiplikativ sabitin seçimi bu şərtlə təyin olunur.

Nəzərə alsaq ki, $\varphi_i(\vec{r})$ periodik funksiyadır, onda $|\varphi_i(\vec{r})|^2$ -ni $V_s = (\vec{a}_1, [\vec{a}_2, \vec{a}_3])$ bir elementar qəfəsin həcmi üzrə inteqrallamaq kifayət edir. Kristalda belə qəfələrin sayı N olduğundan, aydındır ki,

$$\int_G |\varphi_i(\vec{r})|^2 d\tau = N \int_{V_s} |\varphi_i(\vec{r})|^2 d\tau = 1 \quad (2.10.22)$$

və bununla da $\varphi_i(\vec{r})$ üçün normalaşma şərti

$$\int_{V_s} |\varphi_i(\vec{r})|^2 d\tau = N^{-1} \quad (2.10.23)$$

kimi də yazıla bilər. Adətən $\varphi_i(\vec{r})$ -i V_s həcmi üzrə vahidə normalaşdırmaq qəbul olunmuşdur:

$$\int_{V_s} |\varphi_i(\vec{r})|^2 d\tau = 1. \quad (2.10.24)$$

Onda vahidə normalaşmış $\psi(\vec{r})$

$$\psi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(\vec{k}\vec{r})} \varphi_i(\vec{r}) \quad (2.10.25)$$

şəklində olmalıdır.

§ 2.11. Kvazisərbəst (zəif rabitəli) elektron yaxınlaşması

Elektronun periodik sahədə hərəkətini nəzərdən keçirərək, biz hərəkət inteqrallarını tapdıq, effektiv kütlə anlayışını daxil etdik, orta sürət, kvaziimpuls, təcil və xarici qüvvə arasındakı əlaqəni müəyyən etdik. Bütün bu kəmiyyətlər birbaşa və ya dolaylı yolla enerjinin kvaziimpulsdan $E(\vec{p})$ və ya dalğa vektorundan $E(\vec{k})$ asılılığı ilə əlaqədardır. $E(\vec{k})$ - asılılığının ümumi şəkildə təyini çox mühüm, amma bərk cisim üçün hələ də həll olunmamış bir problemdir. Bununla belə bərk cisimlərdə və ilk növb-

bədə yarımkeçiricilərdə baş verən çoxlu proseslərə aydınlıq gətirmək məqsədi ilə təqribi yaxınlaşma üsullarının köməyi ilə $E(\vec{k})$ asılılığının ümumi xarakterini müəyyən etmək çox böyük əhəmiyyət kəsb edir.

$E(\vec{k})$ asılılığını ümumi şəkildə tapmaq üçün həyəcanlaşma nəzəriyyəsi üsulundan istifadə edək. Elektronun periodik sahədə hərəkət tənliyinin həllində bir-birindən sıfırıncı yaxınlaşmanın seçimi ilə fərqlənən iki yaxınlaşma mövcuddur. Sıfırıncı yaxınlaşma kimi sərbəst zərrəciyi götürüb, kristalın periodik sahəsinə həyəcanlanma kimi baxaraq, zəif rabitəli və ya kvazisərbəst elektron nəzəriyyəsinə gəlirik. Əgər sıfırıncı yaxınlaşma kimi kristalı təşkil edən izolə olunmuş atomlardakı elektronları götürsək, onda güclü rabitəli və ya kvazi-bağlı elektron nəzəriyyəsinə gəlirik. Əvvəlcə birinci halı nəzərdən keçirək.

Kristalın periodik sahəsinin hamiltonianını aşağıdakı kimi təsvir edək:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}(\vec{r}) \quad (2.11.1)$$

Burada $\hat{H}_0 = \hat{T}$ «həyəcanlanmamış» sistemin, $\hat{W}(\vec{r}) = \hat{U}(\vec{r})$ isə «həyəcanlanmanın» hamiltonianlarıdır:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r}) = \hat{T} + \hat{U}(\vec{r}); \quad \hat{U}(\vec{r}) \equiv U(\vec{r}). \quad (2.11.2)$$

Həyəcanlanma nəzəriyyəsinin əsas məsələsi həyəcanlanmanın təsiri altında enerji E^0 və dalğa funksiyası ψ^0 -a olan düzəlişləri tapmaqdır. Sərbəst zərrəciyin enerji spektrini və dalğa funksiyasını müəyyən edək. Bunun üçün $\hat{H}_0 = \hat{T}$ hamiltonianı ilə sərbəst zərrəciyin Şredinger tənliyini yazaq:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^0(\vec{r}) = E^0 \psi^0(\vec{r}) \quad (2.11.3)$$

Bu tənliyin həlli müstəvi de-Broyl dalğaları

$$\psi_k^0(\vec{r}) = A e^{i(\vec{k}\vec{r})} \quad (2.11.4)$$

və kəsilməz enerji spektri şəklindədir

$$E^0(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \quad (2.11.5)$$

Beləliklə, sıfırıncı yaxınlaşmada kristalda elektronun enerjisi kəsilməzdir, o dalğa vektoru və kvaziimpulsdan kvadratik asılıdır, bu zaman kvaziimpuls adi impuls ilə eynidir; effektiv kütlə sıfırıncı tərtibdən tenzordur (skalyardır) və sərbəst elektronun adi kütləsi ilə eynidir:

$$m'^{-1} = \frac{d^2 E^0}{\hbar^2 d\bar{n}^2} = m^{-1}; \quad m' \equiv m. \quad (2.11.6)$$

De-Broyl dalğasının amplitudu bütün fəza üzrə inteqrallamada δ -funksiyaya normalaşmada $A = 1/\sqrt{(2\pi)^3}$ və ya G oblastı üzrə vahidə normalaşmada $A = 1/\sqrt{G}$ olduğundan, normalaşmış məxsusi funksiya

$$\psi_i^0(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{k}'\vec{r})}; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\vec{k}'}^0(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) d\tau = \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \quad (2.11.7)$$

$$\psi_i^0(\vec{r}) = \frac{1}{G^{1/2}} e^{i(\vec{k}'\vec{r})}; \quad \int_G \psi_{\vec{k}'}^0(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) d\tau = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}. \quad (2.11.8)$$

şəklindədir.

Birinci yaxınlaşmada həyəcanlanma nəzəriyyəsinə uyğun olaraq enerji və məxsusi funksiyaları tapmaq üçün həyəcanlanmanın matris elementləri lazım olur:

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = U_{\vec{k}\vec{k}'} = \int \psi_{\vec{k}'}^{0*}(\vec{r}) U(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) d\tau. \quad (2.11.9)$$

Asanlıqla göstərmək olar ki, matris elementləri yalnız \vec{k}' və \vec{k} -nın müəyyən qiymətləri üçün sıfırdan fərqlidir. Doğrudan da $U(\vec{r})$ funksiyası kristal qəfəsin $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ vektorlarına müvafiq periodikliyə malik olduğundan, onu Furiye sırasına ayırmaq olar:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3} C_{\ell} e^{i2\pi \left(\frac{\ell_1 x}{a_1} + \frac{\ell_2 y}{a_2} + \frac{\ell_3 z}{a_3} \right)} = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} e^{i2\pi(\vec{k}\vec{r})}, \quad (2.11.10)$$

$$\vec{b} = \ell_1 \vec{b}_1 + \ell_2 \vec{b}_2 + \ell_3 \vec{b}_3. \quad (2.11.11)$$

(2.11.10)-u (2.11.9)-da nəzərə alsaq:

$$U_{\vec{k}\vec{k}'} = \int_G \frac{1}{G^{1/2}} e^{-i(\vec{k}'\vec{r})} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} e^{i2\pi(\vec{k}\vec{r})} \frac{1}{G^{1/2}} e^{i(\vec{k}'\vec{r})} d\tau = \frac{1}{G} \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \int_G e^{i(\vec{k} + 2\vec{b} - \vec{k}')\vec{r}} d\tau = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}} \delta_{\vec{k}\vec{k} + 2\vec{b}} = \begin{cases} 0, & \vec{k}' \neq \vec{k} + 2\vec{b} \\ C_{\vec{k}}, & \vec{k}' = \vec{k} + 2\vec{b} \end{cases} \quad (2.11.12)$$

Beləliklə, $U_{\vec{k}\vec{k}'}$ matris elementləri ya sıfır, ya da $U(\vec{r})$ -in Furiye sırasının əmsallarına bərabərdir.

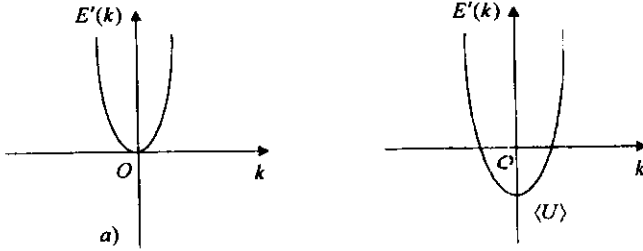
Birinci yaxınlaşmada $E^0(\vec{k})$ enerjisinə əlavə $E'(\vec{k})$ həyəcanlanma operatorunun diaqonal matris elementlərinə bərabərdir:

$$E'(\vec{k}) = U_{\vec{k}\vec{k}} = \frac{1}{G} \int_G U(\vec{r}) d\tau = \langle U \rangle \quad (2.11.13)$$

Daha doğrusu $E'(\vec{k})$ əlavəsi potensial enerjinin G oblastı üzrə ortalaşmış qiymətinə $\langle U \rangle$ bərabərdir; bu düzəliş \vec{k} -dan asılı deyil.

Buradan görünür ki, həyəcanlanma nəzəriyyəsinə görə birinci yaxınlaşmada periodik sahənin təsiri ilə enerji spektri dəyişmir, yalnız $E^0(\vec{k})$ enerji səviyyələri eyni bir $\langle U \rangle$ kəmiyyəti qədər yerini dəyişir:

$$E^{(1)}(\vec{k}) = E^0(\vec{k}) + E'(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \langle U \rangle. \quad (2.11.14)$$



Şək. 2.4. Kvizisərbəst elektron nəzəriyyəsində həyəcanlanmaya görə sıfırıncı (a) və birinci yaxınlaşmada (b) elektronun enerji spektri

$\langle U \rangle$ kəmiyyəti Zommerfeldin metalların elementar nəzəriyyəsinə görə real kristalın modelləşdiriyi potensial çuxurun dibinə uyğundur. $\langle U \rangle$ - elektronun metaldan həqiqi çıxış işidir (şəkil 2.4). Hesablama başlanğıcını elə seçək ki, $\langle U \rangle = 0$ olsun.

Enerjiyə olan düzəlişə ikinci yaxınlaşmada baxaq. İkinci yaxınlaşmada enerjinin qiyməti

$$\begin{aligned} E^{(2)}(\vec{k}) &= E^0(\vec{k}) + E'(\vec{k}) + E''(\vec{k}) = E^{(0)}(\vec{k}) + \langle U \rangle + \sum_{\vec{k}'} \frac{|U_{\vec{k}\vec{k}'}|^2}{E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k}')} = \\ &= E^{(0)}(\vec{k}) + \sum_{\vec{k}'} \frac{|C_{\vec{k}}|^2}{E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{b})} \end{aligned} \quad (2.11.15)$$

kimi ifadə oluna bilər. Buradan görünür ki, ikinci yaxınlaşmada enerjiyə olan düzəliş $|C_{\vec{k}}|^2$ ilə mütənəsbdir, ona görə də

$$E^0(\vec{k}) \gg E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{b}) \quad (2.11.16)$$

hallarında enerjiyə olan düzəliş çox kiçikdir və enerji spektri dəyişmir. Bu zaman dalğa funksiyası

$$\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) + \sum_{\vec{k}'} \frac{C_{\vec{k}}}{E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{b})} \psi_{\vec{k} + 2\pi\vec{b}}^0(\vec{r}) \quad (2.11.17)$$

şəklindədir və həmin şərtlər daxilində həyəcanlanma elektronun sərbəst hərəkətinə uyğun dalğa funksiyasını cüzi dəyişdiyini hesab etmək olar. Amma $E^{(0)}(\vec{k}) - E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{b})$ kəsrin sürəti $|C_{\vec{k}}|^2$ ilə yaxın olduqda axırıncı ifadədən görüldüyü kimi dalğa funksiyası kəskin dəyişir, elektronun sərbəst hərəkəti güclü həyəcanlaşır. Hər hansı hal üçün məxrəc sıfıra bərabər olan hallarda həyəcanlaşma maksimuma çatır. Fərz edək ki, $\vec{b} = \vec{g}$ olan halda məxrəc sıfra yaxınlaşır. Bu halda (2.11.15) və (2.11.17) ifadəsi mənasını itirir, qeyri-müəyyən olur. $E^{(0)}(\vec{k}) \rightarrow E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{b})$ olduqda $\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r})$ -nin əmsalı sonsuzluğa yaxınlaşır; bu o deməkdir ki, $\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r})$ -in $\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r})$ halındakı payı $\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r})$ -in payından az deyil. $E^0(\vec{k}) = E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g})$ bərabərliyi dəqiq ödənilən halda isə $E^0(\vec{k})$ halı cırılmış olur, belə ki, enerjinin eyni bir qiymətinə $\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r})$ və $\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r})$ kimi iki müxtəlif hal funksiyası uyğun gəlir. Cırılmış hallar üçün dalğa funksiyası həyəcanlanma nəzəriyyəsinə uyğun olaraq

$$\psi^0(\vec{r}) = \alpha\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) + \beta\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r}) \quad (2.11.18)$$

şəklindədir, burada α və β naməlum əmsallardır. Cırılmamış hallar üçün $\alpha \gg \beta$, cırılmış hallar üçün isə α və β əmsalları eyni tərtibli kəmiyyətlərdir. Bu hal bütün

$$|E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g})| \leq |C_{\vec{k}}|^2 \quad (2.11.19)$$

şərtində ödənilir. Beləliklə, sıfırıncı yaxınlaşma kimi (2.11.18) funksiyasını götürüb, onu

$$(\hat{H}^0 + \hat{U})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.11.20)$$

tənliyində yerinə yazıb $\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r})$ və $\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r})$ funksiyalarının \hat{H}^0 -in məxsusi funksiyaları olduğunu nəzərə alsaq,

$$\alpha E^0(\vec{k})\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) + \beta E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g})\psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r}) + u(\vec{r})\psi^0(\vec{r}) = E\psi^0(\vec{r}) \quad (2.11.21)$$

alırıq. Sadəlik üçün aşağıdakı işarələmələri aparırıq:

$$\psi_{\vec{k}}^0(\vec{r}) = \psi_1; \psi_{\vec{k}+2\pi\vec{g}}^0(\vec{r}) = \psi_2; E^0(\vec{k}) = E_1; E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g}) = E_2 \quad (2.11.22)$$

və (2.11.21) tənliyini yeni işarələmələrlə yazırıq:

$$\alpha E_1\psi_1 + \beta E_2\psi_2 + U(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = E(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2). \quad (2.11.23)$$

Bu tənliyi soldan uyğun olaraq ψ_1' və ψ_2' -yə vurub, \vec{r} üzrə inteqrallasaq:

$$\left. \begin{aligned} \alpha E_1 + \alpha U_{11} + \beta U_{12} &= E_{\alpha} \\ \beta E_2 + \alpha U_{21} + \beta U_{22} &= E_{\beta} \end{aligned} \right\} \quad (2.11.24)$$

və ya

$$\left. \begin{aligned} (E_1 + U_{11} - E)\alpha + U_{12}\beta &= 0 \\ U_{21}\alpha + (E_2 + U_{22} - E)\beta &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.11.25)$$

alırıq. Bu tənlik E, α, β kimi üç məchula malikdir. **Tənliklər sisteminin qeyri-trivial həllə malik olması üçün sistemin determinantı sıfıra bərabər olmalıdır ki**, bu da lazım olan üçüncü tənliyə verir və buradan E enerjisini təyin edə bilərik:

$$\begin{vmatrix} (E_1 + U_{11} - E) & U_{12} \\ U_{21} & (E_2 + U_{22} - E) \end{vmatrix} = 0 \quad (2.11.26)$$

Bu tənliyi həll edərək və $U_{11} = U_{22} = \langle U \rangle = 0$ olduğunu nəzərə alsaq

$$E = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1 - E_2)^2}{4} + U_{12}U_{21}} \quad (2.11.27)$$

olar. Əvvəlki işarələmələrə qayıtsaq

$$E^{(0)}_{(\vec{k})} = \frac{E^0(\vec{k}) + E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g})}{2} \pm \sqrt{\frac{[E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g})]^2}{4} + |U_x|^2} \quad (2.11.28)$$

alırıq. Buradan görünür ki, $W(\vec{r}) = U(\vec{r})$ həyəcanlanması ilə $E^0(\vec{k}) = E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g})$ şərti ödənilən nöqtələrlə enerji sıçrayışa uğrayır. **Bu nöqtələr üçün $E(\vec{k}) = E^0(\vec{k}) \pm |U_x|$ olur və sıçrayışın qiyməti $2|U_x|$ -dir.** Kəsilmə şərtini başqa şəkildə ifadə edək:

$$\begin{aligned} E^0(\vec{k}) - E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g}) &= \frac{\hbar^2}{2m} [\vec{k}^2 - (\vec{k} + 2\pi\vec{g})^2] = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} [4\pi^2 \vec{g}^2 + 4\pi(\vec{k}\vec{g})] = 0, \end{aligned} \quad (2.11.29)$$

və ya

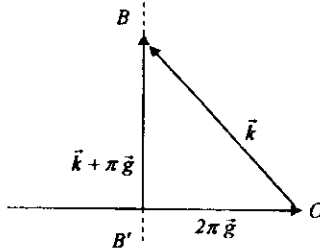
$$(\vec{k} + \pi\vec{g}, \vec{g}) = 0 \quad (2.11.30)$$

Bu şərt əyani həndəsi və fiziki məna kəsb edir. Bu şərtədən görünür ki, $\vec{k} + \pi\vec{g}$ və \vec{g} vektorları ortoqonaldır. $2\pi\vec{g}$ vektorunu quraq. Şəkil -dən görüldüyü kimi, $2\pi\vec{g}$ vektorunun ortasından ona perpendikulyar keçirilmiş BB' müstəvisi üzərində yerləşən ixtiyari vektor $2\pi\vec{g}$ və ya \vec{g} vektoruna perpendikulyar olacaqdır. Əgər \vec{k} vektorunun şəkildə göstərilədiyi kimi yerləşdirsək ki, onun sonu BB' müstəvisi üzərinə düşsün, onda \vec{k} və $\pi\vec{g}$ vektorlarının cəmi $\vec{k} + \pi\vec{g}$ vektoru (2.11.30) şərtini ödəyir, deməli bu \vec{g} vektoruna perpendikulyar müstəvinin tənliyi olur. \vec{k} -nin (2.11.19) şərtini ödəyən bütün qiymətlərini tapmaq üçün bütün \vec{g} vektorlarını vermək lazımdır. Bunun üçün \vec{k} fəzasında $2\pi\vec{b}_1, 2\pi\vec{b}_2, 2\pi\vec{b}_3$ bazisli tərs qəfəsi qurub,

qəfəsin bütün düyün nöqtələrindən $\vec{k} = 0$ koordinat başlanğıcına $2\pi\vec{g}$ vektorlarını keçirmək lazımdır. $2\pi\vec{g}$ vektorlarının ortalarından onlara perpendikulyar keçirilmiş müstəvilər toplusu

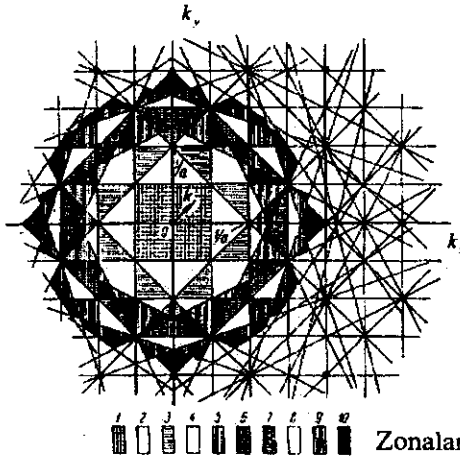
$$E^0(\vec{k} + 2\pi\vec{g}) = E^0(\vec{k}) \text{ və ya } (\vec{k} + \pi\vec{g}, \vec{g}) = 0 \quad (2.11.31)$$

şertini ödəyən bütün \vec{k} vektorlarını təyin edir.



Şək. 2.5. Enerjinin kəsilməyə məruz qaldığı müstəvinin qurulması

Beləliklə, (2.11.30) tənliyi istənilən kristalın tərs qəfəsinə görə Brillyüen zonalarını qurmağa imkan verir. Şəkil 2.6-da müxtəlif \vec{g} vektorları üçün (2.11.30) tənliyini ödəyən müstəvilərin qurulması təsvir olunmuşdur. (2.11.30) tənliyinə görə Brillyüen zonalarının qurulması ən təbii hal kimi qiymətləndirilir. Əsas zonanı qurmaq üçün $\vec{k} = 0$ nöqtəsini özündə saxlayan minimal çoxüzlünü seçmək lazımdır. Həcmə görə sonrakı çoxüzlünü tapıb, ondan birinci zonanı təcrid etməklə, ikinci Brillyüen zonasını tapa bilərik və s. belə ardıcılıqla sonrakı zonalər da müəyyənləşdirilə bilər.

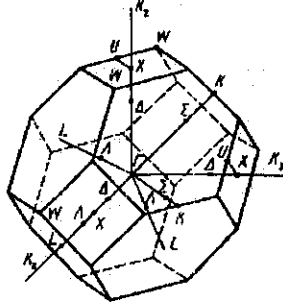


Şək. 2.6. Müstəvi kvadratik qəfəs üçün Brillyüen zonaları

Sadə kubik qəfəs üçün tərs qəfəs də sadə kubik qəfəs olur. Əgər koordinat başlanğıcı $\vec{k} = 0$ nöqtəsini qəfəsin düyünlərindən birində yerləşdirsek, onda $\vec{k} = 0$ nöqtəsinə ən yaxın altı ədəd düyün olur, onlar altı ədəd qarşılıqlı ortoqonal müstəvilər verir ki, bunlar dalğa vektoru fəzasında tərəfləri $2\pi/a$ və həcmi $8\pi^3/a^3$ olan kub əmələ gətirirlər. Bu zaman hesablama başlanğıcı $\vec{k} = 0$ qəfəsin düyünlərindən biri ilə üst-üstə düşür, tərs qəfəs $2\pi\vec{b}_1, 2\pi\vec{b}_2, 2\pi\vec{b}_3$ bazisləri əsasında qurulur.

Səthə mərkəzləşmiş kubik kristalın tərs qəfəsi həcmə mərkəzləşmiş kubik qəfəsdür, və deməli, onun hər bir düyün nöqtəsi səkkiz ən yaxın qonşuya malikdir.

Koordinat başlanğıcını $\vec{k} = 0$ kubik təpələrindən birində yerləşdirsek, bu təpəni digər düyünlərlə birləşdirən səkkiz parçanın ortasından perpendikulyar keçən 8 müstəvi bir-biri ilə kəşişərək düzgün səkkizüzlü (oktaedr) əmələ gətirir. Kəşici müstəvilər diaqonalların $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$, $(-\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ və s. koordinatlı nöqtələrindən keçir. Nəticədə şəkl.2.7-də göstərilən Brilliyen zonası alınır. Bu 8 dənə düzgün altıbucaqlı və 6 dənə kvadratdan ibarət ondüzdüzlüdür.



Şəkl. 2.7. Səthə mərkəzləşmiş kubik qəfəs üçün Brilliyen zonaları.

Nöqtələrin koordinatları $\frac{\pi}{a}$ -larla göstərilmişdir.

Göstərmək olar ki, birinci, ikinci və s. Brilliyen zonalarının həcmliəri bir-birinə bərabərdir. Beləliklə, birinci Brilliyen zonasının hər bir nöqtəsinə ikinci, üçüncü və s. zonalarda bir nöqtə uyğun gəlir, yeni

bütün Brillyüen zonalarında elektron səviyyələrinin sayı eynidir. Deməli, əgər biz birinci Brillyüen zonası üçün elektronun hallarını tapmış olsaq, onda digər zonalar üçün də bu eyni olaraq təkrarlanacaq. Ona görə də hesablamaları yalnız birinci Brillyüen zonası üçün aparmaq kifayətdir. Yəni istənilən digər zonanı həmişə faza fəzasında birinci zonaya götürmək olar. Məhz bunun üçün adətən birinci zonaya götürülmüş Brillyüen zonası da deyilir. (2.11.30) tənliyinin həndəsi mənasını araşdırmaqla, onun fiziki mənasını müəyyənləşdirək. $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, burada λ - de-Broyl dalğasının uzunluğudur, $|\vec{b}| = \ell/d$, burada ℓ - tam ədəd, d isə \vec{b} vektoruna uyğun düz qəfəsin atom müstəviləri ailəsində ən yaxın müstəvilər arasındakı məsafədir; \vec{k} vektoru ilə müstəvinin normalı arasındakı bucağı (düşmə bucağını) θ ilə işarə edib, (2.11.30) şərtini

$$(\vec{k}\vec{b}) + \pi\vec{b}^2 = 0 \quad (2.11.32)$$

və ya

$$-\frac{2\pi}{\lambda} \frac{\ell}{d} \cos\theta + \pi \frac{\ell^2}{d^2} = 0 \quad (2.11.33)$$

kimi yazıb bilərik. ℓ, d və π -yə ixtisar edərək

$$2d \cos\theta = \ell\lambda \quad (2.11.34)$$

yəni rentgen şüalarının interferensiyası üçün Vulf-Breqq şərtini (θ -bucağını sürüşmə deyil, düşmə bucağı olduğu fərqi nəzərə almaqla) alırırıq.

Beləliklə, cırılma Brillyüen zonalarının sərhəddində yerləşən hallar üçün müşahidə olunacaq, bu isə məhz Vulf-Breqq qayıtmasının müşahidə olunduğu hallardır.

Bu zaman enerjinin iki müxtəlif qiymətinə dalğa funksiyalarının cəmi və fərqi şəklində iki müxtəlif kombinasiyası uyğun gəlir. Bu iki dalğanın cəmi kristalın uyğun atom müstəvilərinin paralel Brillyüen zonasının sərhəddi boyu $\vec{\pi}\vec{g} + \vec{k}$ vektoru istiqamətində yayılan dalğanı verir. Beləliklə, enerjinin kəsilmə səbəbinin çox sadə və aydın izahına gəlirik. **Vulf-Breqq qayıtması nəticəsində düşən və qayıdan dalğalar interferensiya edirlər; atom müstəvilərinə perpendikulyar istiqamətlərdə durğun dalğalar yaranır, qaçan dalğalar isə yalnız atom müstəviləri boyunca yayıla bilərlər.** Qadağan olunmuş hallara müvafiq olaraq enerjinin də müəyyən qiymətləri qeyri-minimum olur. Brillyüen zonalarının bütün sərhədlərində enerji kəsilməyə məruz qalır.

Brillyüen zonalarının sərhədlərinə yaxın hissələrdə də müəyyən həyəcanlanma baş verir. Kəsilmə nöqtələri ətrafında

$$E(\bar{k}) = \frac{E^0(\bar{k}) + E^0(\bar{k} + 2\pi\bar{g})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{E^0(\bar{k}) + E^0(\bar{k} + 2\pi\bar{g})}{2} \right]^2 + |U_s|^2} \quad (2.11.35)$$

və ya

$$E(\bar{k}) = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi}{m} (\bar{g}, \bar{k} + \pi\bar{g}) \pm \sqrt{\left(\frac{\pi\hbar^2}{m} \right)^2 (\bar{g}, \bar{k} + \pi\bar{g})^2 + |U_s|^2} \quad (2.11.36)$$

yaza bilərik. Brillyüen zonasının sərhəddindəki nöqtələrin dalğa vektorlarını \bar{k}_0 -la işarə edək. $(\bar{g}, \bar{k}_0 + \pi\bar{g}) = 0$ olduğundan,

$$E(\bar{k}_0) = \frac{\hbar^2 \bar{k}_0^2}{2m} \pm |U_s| \quad (2.11.37)$$

alınır. Belə olan təqdirdə ixtiyari \bar{k} halı üçün

$$E(\bar{k}) - E(\bar{k}_0) = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \bar{k}_0^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi}{m} (\bar{g}, \bar{k} + \pi\bar{g}) \pm \sqrt{\left(\frac{\pi\hbar^2}{m} \right)^2 (\bar{g}, \bar{k} + \pi\bar{g})^2 + |U_s|^2} = |U_s| = f(\bar{k}) \quad (2.11.38)$$

yaza bilərik. Bu ifadəni \bar{k}_0 nöqtələrinə nəzərən Taylor sırasına ayıraraq. Aydındır ki, $f(\bar{k}_0) = 0$. Elektronların sürəti üçün

$$\bar{v} = \frac{dE(\bar{k})}{\hbar d\bar{k}} = \frac{\hbar \bar{k}}{m} + \frac{\pi \hbar \bar{g}}{m} \pm \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\pi \hbar^2}{m} \right)^2 \frac{(\bar{g}, \bar{k} + \pi\bar{g}) \bar{g}}{\sqrt{\left(\frac{\pi \hbar^2}{m} \right)^2 (\bar{g}, \bar{k} + \pi\bar{g})^2 + |U_s|^2}} \quad (2.11.39)$$

alınır. Sərbəst hərəkət (Brillyüen zonasının sərhəddi yaxınlığında yerləşməyən hallar) üçün sürət

$$\bar{v} = \frac{\hbar \bar{k}}{m} \quad (2.11.40)$$

olduğu halda, Brillyüen zonasının sərhədləri yaxınlığında sürət kvaziimpulsu eyni istiqamətli olur. Zonanın sərhəddində $\bar{k} = \bar{k}_0$ olduğundan

$$\bar{v} = \frac{\hbar \bar{k}_0}{m} + \frac{\pi \hbar \bar{g}}{m} = \frac{\hbar}{m} (\bar{k}_0 + \pi\bar{g}) \quad (2.11.41)$$

alınır. Qeyd edək ki, $\bar{k}_0 + \pi\bar{g}$ vektoru zonanın sərhəd müstəvisində yerləşir. Enerjinin kəsilməyə məruz qaldığı nöqtələrdə sürət sərhəd boyu yönəlir. Aydındır ki, sürət Brillyüen zonalarının kiçik yaxın ətrafındakı nöqtələrdə də sərhəd müstəvilərin paralel üstün istiqamətlərə malik olacaqdır. $\left. \frac{dE}{d\bar{k}} \right|_{\bar{k}_0}$ sərhəd müstəvisində yerləşdiyindən, izoenergetik səthlər kə-

silməyə məruz qaldıqları Brillyüen zonalarının sərhədlərinə ortoqonaldırlar. $\vec{k}_0 = -\pi\vec{g}$ halı üçün sürət sıfıra bərabər olur, bu isə atom müstəvilərinə perpendikulyar istiqamətdə mümkünsüz olduğunu göstərir. Bu nöqtələr üçün $\frac{dE}{dk} = 0$ olduğundan, həmin nöqtələrdə enerji ekstremum qiymətlər alır. İkinci törəməni tapaq:

$$\frac{d^2 E(\vec{k})}{\hbar^2 d\vec{k}^2} = \frac{1}{m} \pm \frac{\pi^2 \hbar^2}{m^2} \frac{\vec{g}^2 |U_s|^2}{\left\{ \left(\frac{\pi \hbar^2}{m} \right)^2 (\vec{g}, \vec{k} + \pi \vec{g})^2 + |U_s|^2 \right\}^{3/2}} \quad (2.11.42)$$

Brillyüen zonasının sərhəddindəki nöqtələr üçün

$$\left. \frac{d^2 E(\vec{k})}{\hbar^2 d\vec{k}^2} \right|_{\vec{k}_0} = \frac{1}{m} \left(1 \pm \frac{\pi^2 \hbar^2 \vec{g}^2}{m |U_s|} \right) \quad (2.11.43)$$

\vec{k}_0 ekstremum nöqtəsi olsa

$$\left. \frac{d^2 E(\vec{k})}{\hbar^2 d\vec{k}^2} \right|_{\vec{k}_0} = \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} \left(1 \pm \frac{\pi^2 \hbar^2 \vec{g}^2}{m |U_s|} \right) \quad (2.11.44)$$

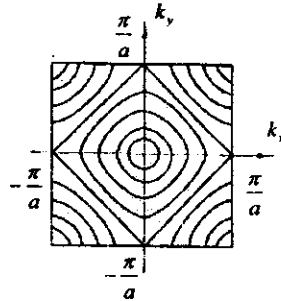
və ya

$$m^* = \frac{m}{1 \pm \frac{\pi^2 \hbar^2 \vec{g}^2}{m |U_s|}} \quad (2.11.45)$$

olar. «+» və «-» işarələri enerjinin minimum və maksimum qiymətlərinə uyğundur. Qiymətləri yerinə qoysaq, m^* -i qiymətləndirmək olar; $\hbar \approx 10^{-34}$ c.san, $\pi \vec{g} \approx 10^{10} m^{-1}$, $m \approx 10^{-30}$ kq götürsək $(\pi \hbar \vec{g}) / m \approx (10^{-34} \cdot 10^{10})^2 / 10^{-30} = 10^{-18} c \approx 6 eV$; $|U_s| \approx 1 eV$ qəbul etsək, $m^* = m(1 \pm 6)$ alınır, yəni enerjinin minimumu üçün $m^* < 0$, maksimumu üçün isə $m^* > 0$, eyni zamanda $|m^*| < m$, yəni effektiv kütlə sərbəst elektronun kütləsindən kiçikdir. (2.11.45)-də məxrəcdə vahidi nəzərə almasaq

$$\frac{m^*}{m} \pm \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 \vec{g}^2} |U_s|$$

alınır, yəni a) m^* -qadağan zonasının eni ilə mütənəsibdir; b) enerjinin artması ilə $|m^*|$ azalır, belə ki, daha yüksək enerji zonaların

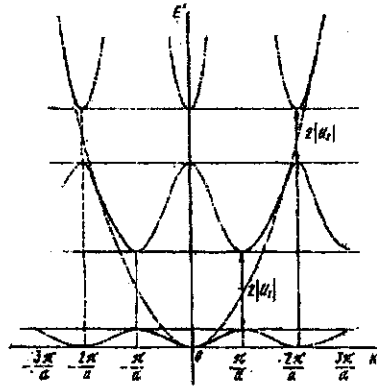


Sək.2.8. Müstəvi kvadratik qəfəsin izoenergetik xətləri

da $|m'|$ aşağıdakı zonalardakına nəzərən daha kiçikdir.

Brillyüen zonalarında hər hansı istiqamətdə izoenergetik səthlərin formasının və enerjinin \bar{k} -dən asılılığına baxaq.

$\bar{k} = 0$ olduqda birinci Brillyüen zonasının yaxın ətrafında izoenergetik səthlər sferik formadadırlar. Şəkil 2.8 -də $k_x = 0$ müstəvisində izoenergetik xətlər təsvir olunmuşdur. Mərkəzdən uzaqlaşdıqca sferalar deformasiyaya uğrayırlar. Əgər zonaların künclərində enerji səviyyələrinin ellipsoidin hissələri olduğunu nəzərə alsaq, bunu asanlıqla anlamaq olar.



Şəkil 2.9. Hər hansı istiqamət üzrə enerjinin dalğa vektorundan asılılığı

2.9-cu şəkildə birölçülü kristal qəfəs üçün kvazisərbəst elektronun enerjisini dalğa vektorundan asılılığı göstərilmişdir. İcazəli zonalardan bir-birindən qadağan olunmuş zonalarda ayrılırlar. İcazəli zonalarda daxilində enerji üçün

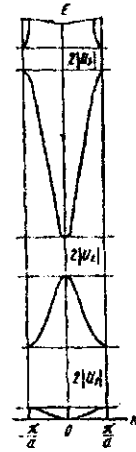
$$E(\bar{k} + 2\pi\bar{b}) = E(\bar{k})$$

periodiklik şərti ödənilir. Bu səbəbə görə enerjinin dalğa vektorundan asılılığı əyrilərinin şəkildəki bütöv hissələri birinci Brillyüen zonasına gətirilə bilər. Bu zaman enerji dalğa vektorunun çoxqiymətli funksiyası olur, amma hər bir enerji zonası və ya zolağı üçün enerji birqiymətlidir (real kristallarda hətta bir zolaqda belə enerji çoxqiymətli funksiya ola bilər). Qrafikləri iki qonşu enerji zonalarının ekstremumları birinci Brillyüen zonasının mərkəzinə düşmək şərti ilə qurmaq daha rahatdır (şək. 2.10).

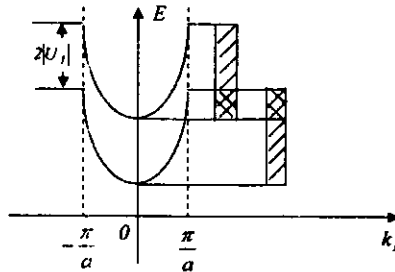
Gələcəkdə görəcəyik ki, real kristallarda müxtəlif enerji zonalarının ekstremumları Brillyüen zonalarının müxtəlif nöqtələrində yerləşə bilər.

Periodik potensialın xarakterindən asılı olaraq icazəli zonalar bir-biri ilə üst-üstə düşə bilər. Onlar arasında enerji fərqi $2|U_1|$ olsun. Kvadratik kristal qəfəsdə hərəkət edən kvazi-sərbəst elektronun enerjisi $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$ kimidir. Bu enerjiyə k_x, k_y və $E(\vec{k})$ koordinatlarında ($E(k)$ -fırlanma oxu olarsa) fırlanma paraboloidi uyğun gəlir. Şəkil 2.11-də bu paraboloidlərin $k_y = 0$ müstəvisində $k_x = \pm \frac{\pi}{a}$ müstəviləri ilə kəsiyindəki $2|U_1|$ enerji fərqi kifayət qədər kiçikdirsə, onda $k_x = \pm \frac{\pi}{a}$ aşağı

zonanın yuxarı sərhəddi, üst zonanın $k=0$ -dakı aşağı sərhəddindən yuxarıda yerləşər, yəni k_x -in müxtəlif qiymətlərində zonalar bir-birini qismən örtə bilər. Bu zaman elektron aşqar və ya qəfəs atomu ilə toqquşarkən onun dalğa vektoru \vec{k} (və ya kvaziimpuls \vec{p}) müəyyən qədər dəyişilə bilər, ona görə də elektron enerjisini dəyişmədən bir zondan digərinə keçə bilər və nəticədə kristalın fiziki xassələrində ciddi dəyişiklik müşahidə oluna bilər.



Şəkil 2.10. Əsas Brillyüen zonasında enerji spektri



Şek. 2.11. İcazəli zonaların bir-birini qismən örtüyü hal

§ 2.12. Kvizibağlı (güclü rabitəli) elektron yaxınlaşması

Bərk cisimlərin zona quruluşunu daha dərin enerji səviyyələrini nəzərə almaqla təqribi hesablamaq üçün Blox tərəfindən təklif olunmuş kvazibağlı (güclü rabitəli) elektron yaxınlaşması tətbiq etmək olar. Belə yaxınlaşmada fərz olunur ki, elektronun izolə edilmiş atomdakı enerjisi kristal qəfəsdəki atomda malik olduğu enerjiden çox az fərqlənir. Təbii ki, belə yanaşmada sərbəst və keçirici elektronuna nisbətən daha çox kimyəvi əlaqələrdə iştirak edən daha dərin təbəqələrdə yerləşən elektronların halı nəzərə alınır. Bu üsul **atom orbitalarının xətti kombinasiyası metodu** adı ilə kvant kimyasında daha geniş istifadə olunur.

Kristal qəfəsin qarşılıqlı təsirdə olmayan atomlardan ibarət olduğunu qəbul edərək, həyəcanlaşma nəzəriyyəsi üsulunu tətbiq edib sıfırıncı yaxınlaşma kimi elektronun kristaldakı halını seçib, periodik sahədə elektron üçün Şredinger tənliyini yazaq:

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}\psi(\vec{r}) &= E\psi(\vec{r}), \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}); U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{n}) \end{aligned} \right\} \quad (2.12.1)$$

İzolə edilmiş atomun hamiltonianını

$$\hat{H}_a = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_a(\vec{r}) \quad (2.12.2)$$

kimi işarə edək. Onda belə atom üçün Şredinger tənliyini aşağıdakı kimi yaza bilərik:

$$\hat{H}_a \psi_a(\vec{r}) = E_a \psi_a(\vec{r}) \quad (2.12.3)$$

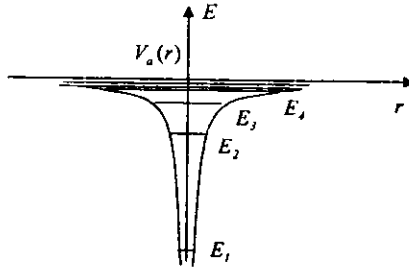
bu tənlikdə $V_a(r)$ - izolə olunmuş atomda elektronun potensial enerjisi; E_a - hər hansı səviyyənin enerjisi, $\psi_a(\vec{r})$ isə E_a səviyyəsinə uyğun dalğa funksiyasıdır. Şəkil 2.12-də izolə olunmuş atomun enerji səviyyələrinin sxemi verilmişdir. Atom dalğa funksiyasının fərqli xüsusiyyəti onun məsafədən çox kəskin asılılığındadır: r -in hər hansı qiymətindən başlayaraq dalğa funksiyası eksponensial qanunla kiçilir (şəkil 2.12). Atom üçün bu tənlik həll olunmuş sayılır. Birinci yaxınlaşmada kristalda elektronun enerjisini tapmaq üçün sıfırıncı yaxınlaşma üçün dalğa funksiyasını seçmək lazımdır. Bu məqsədlə əvvəlcə fərz edirik ki, kristalda atomlar bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə deyildirlər. Koordinat başlanğıcını hər hansı nüvə üzərinə salsaq, qalan nüvələrin koordinatlarını translyasiya vektoru şəklində

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3,$$

kimi təşəvvür etmək olar. Cari radius-vektoru \vec{r} ilə işarə etsək, onda \vec{r} -in sonu ilə \vec{n} nüvəsi arasındakı məsafə $|\vec{r} - \vec{n}|$ olduğundan, n -ci atomdakı elektronun dalğa funksiyası $\psi_n(\vec{r} - \vec{n})$ şəklində yazıla bilər.

Kristaldakı elektronun dalğa funksiyası $\psi^0(\vec{r})$ atom $\psi_n(\vec{r} - \vec{n})$ dalğa funksiyalarından təşkil olunmalıdır:

$$\psi^0(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r} - \vec{n}) \quad (2.12.4)$$



Şək. 2.12. İzolə olunmuş atomun potensial enerjisi və enerji səviyyələri

c_n əmsalları elə seçilir ki, $\psi^0(\vec{r})$ translyasiya şərtini ödəsin:

$$\psi^0(\vec{r} + \vec{n}) = e^{i(\vec{k}\vec{n})} \psi^0(\vec{r}) \quad (2.12.5)$$

Translyasiya şərtinin ödənilməsi üçün c_m əmsalı

$$c_m = e^{i(\vec{k}\vec{m})} \quad (2.12.6)$$

şəklində seçmək olar. Onda (2.12.4) ifadəsini

$$\psi^0(\vec{r}) = \sum_n e^{i(\vec{k}\vec{n})} \psi_n(\vec{r} - \vec{n}) \quad (2.12.7)$$

kimi yaza bilərik. Bu funksiyanın (2.12.5) şərtini ödəməsini asanlıqla yoxlamaq olar:

$$\begin{aligned} \psi^0(\vec{r} + \vec{n}) &= \sum_m e^{i(\vec{k}\vec{m})} \psi_m(\vec{r} - \vec{m} + \vec{n}) = e^{i(\vec{k}\vec{n})} \sum_m e^{i(\vec{k}\vec{m})} \psi_m[\vec{r} - (\vec{m} - \vec{n})] = \\ &= e^{i(\vec{k}\vec{n})} \sum_I e^{i(\vec{k}\vec{I})} \psi_I(\vec{r} - \vec{I}) \end{aligned} \quad (2.12.8)$$

Aydındır ki, $\vec{I} = \vec{m} - \vec{n}$, m -in aldığı qiymətləri alır, amma başqa ardıcılıqla, ona görə də

$$\sum_I e^{i(\vec{k}\vec{I})} \psi_I(\vec{r} - \vec{I}) = \psi^0(\vec{r}) \quad (2.12.9)$$

olur və deməli, translyasiya şərti ödənilir.

$\psi_a(\vec{r} - \vec{l})$ vahidə normalaşdığı halda $\psi^0(\vec{r})$ normalaşmışdır. Onun normalaşdırıcı vuruğunu tapaq:

$$\int \psi^{0*}(\vec{r}) \psi^0(\vec{r}) d\tau = \int \left[\sum_{\vec{n}} e^{-i(\vec{k}\vec{n})} \psi_a^*(\vec{r} - \vec{m}) \right] \left[\sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{k}\vec{n})} \psi_a(\vec{r} - \vec{n}) \right] d\tau = \sum_{\vec{n}} \sum_{\vec{n}'} e^{i(\vec{k}\vec{A} - \vec{m})} \int \psi_a^*(\vec{r} - \vec{m}) \psi_a(\vec{r} - \vec{n}) d\tau. \quad (2.12.10)$$

Əgər

$$\vec{r} - \vec{m} = \vec{r}'; \quad \vec{r} = \vec{r}' + \vec{m}; \quad d\tau = d\tau' \quad (2.12.11)$$

olsa, onda

$$\int \psi_a^*(\vec{r} - \vec{m}) \psi_a(\vec{r} - \vec{n}) d\tau = \int \psi_a^*(\vec{r}') \psi_a[\vec{r}' - (\vec{n} - \vec{m})] d\tau'. \quad (2.12.12)$$

$\psi_a^*(\vec{r})$ və $\psi_a[\vec{r} - (\vec{n} - \vec{m})]$ dalğa funksiyalarının hasilinin inteqralı \vec{n} və \vec{m} nüvələrinin vəziyyətindən deyil, yalnız, onlar arasındakı $\vec{l} = \vec{n} - \vec{m}$ məsafəsindən asılıdır.

$$\int \psi_a^*(\vec{r}) \psi_a(\vec{r}' - \vec{l}) d\tau' = S, \quad (2.12.13)$$

ilə işarə edək. $\vec{l} = 0$ olduqda, $S_l = 0$. Əgər nüvələr arasındakı məsafə çox böyük olarsa, dalğa funksiyaları bir-birini örtmür və S , praktiki olaraq sıfıra bərabər olur. S , kəmiyyətləri yalnız \vec{l} -lərin kiçik qiymətləri üçün sıfırdan fərqli olacaq. $\vec{n} - \vec{m}$ və $\vec{l}\vec{m}$ -in fikse olunmuş hər bir qiymətində eyni qiymətlər üzrə dəyişdiyindən, \vec{n} üzrə cəm \vec{l} üzrə cəmə bərabər olacaqdır:

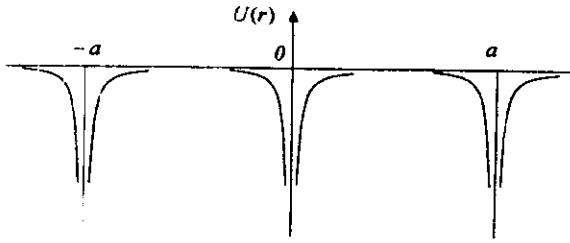
$$\sum_{\vec{n}} e^{i(\vec{k}\vec{A} - \vec{m})} \int \psi_a^*(\vec{r} - \vec{m}) \psi_a(\vec{r} - \vec{n}) d\tau = \sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{k}\vec{l})} S_l \quad (2.12.14)$$

İkinci cəm işarəsinin altında eyni şəkilli $\left[\sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{k}\vec{l})} S_l \right]$ hədləri durur və onların sayı kristaldakı N - atomlar sayına bərabərdir. Onda

$$\int \psi^{0*}(\vec{r}) \psi^0(\vec{r}) d\tau = N \sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{k}\vec{l})} S_l \quad (2.12.15)$$

alırıq. İndi həyəcanlanma operatorunun görünüşünü tapaq. Fərz edək ki, kristal o qədər dartılıb ki, atomlar arasında əlaqələr nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçilib. Onda kristalın periodik potensial sahəsi izole olunmuş atomun təkrarlanan periodik potensial sahəsi olur (şək. 2.13). Ona görə

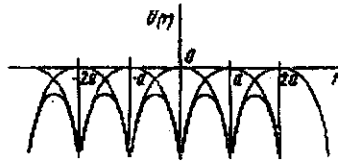
$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} V_a(\vec{r} - \vec{n}) \quad (2.12.16)$$



Şek. 2.13 «Dartılmış» kristal qəfəsin sahəsi

Bu cəmin fərqli xüsusiyyəti ondadır ki, hər bir \vec{r} nöqtəsində $U(\vec{r})$ funksiyası ən yaxın atomun potensial əyrisi ilə müəyyən olunur. Atomlar bir-birinə yaxınlaşdıqda izole olunmuş atomların potensial əyriləri elektronun bütün nüvələrin sahələrindəki potensial enerjisini verir (şəkil 2.14), amma bu zaman atomlar arasındakı qarşılıqlı təsir nəzərə alınmır, başqa sözlə, cəm özünə uzlaşan deyil. Fərz edək ki, qəfəsin özünə uzlaşan potensial enerjisi hər hansı $W(\vec{r})$ enerjisini əlavə etməklə əldə olunur:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} V_s(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \quad (2.12.17)$$



Şek. 2.14. Elektron təbəqələrinin qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmayan halda kristal qəfəsin sahəsi

$W(\vec{r})$ funksiyası periodikdir, belə ki, $U(\vec{r})$ və $\sum_{\vec{n}} V_s(\vec{r} - \vec{n})$ funksiyaları periodikdir; $W(\vec{r})$ funksiyası xüsusi nöqtələrə malik deyil; $U(\vec{r})$ -in xüsusi nöqtələri $V_s(\vec{r} - \vec{n})$ -atom potensial əyriləri ilə ötürülür. Başqa sözlə, $W(\vec{r})$ sıfıra yaxın, $W(\vec{r})$ isə hər yerdə məhduddur. $W(\vec{r})$ -in analitik ifadəsi «məlum» $U(\vec{r})$ və $V_s(\vec{r} - \vec{n})$ -lər üzrə asanlıqla tapılır:

$$W(\vec{r}) = U(\vec{r}) - \sum_{\vec{n}} V_s(\vec{r} - \vec{n}) \quad (2.12.18)$$

$W(\vec{r})$ enerjisi atomlar cəzb olunduğu hallarda ($r \geq a$) mənfi, kristal çox güclü sıxıldıqda onlar bir-birindən itələnməyə başladıkları halda ($r < a$) isə müsbət olur.

Kristalda elektronun enerjisini tapmaq. Məlumdur ki, sıfırıncı yaxınlaşmada ψ^0 dalğa funksiyası birinci yaxınlaşmada $E^{(1)}$ enerjini tapmağa imkan verir:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_{\alpha}(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \right] \psi^0(\vec{r}) = E^{(1)} \psi^0(\vec{r}) \quad (2.12.19)$$

Bu tənliyi soldan $\psi^{0*}(\vec{r})$ -ə vurub, onu kristalın həcmi üzrə inteqrallasaq:

$$E^{(1)} = \frac{\int \psi^{0*}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_{\alpha}(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \right] \psi^0(\vec{r}) d\tau}{\int \psi^{0*}(\vec{r}) \psi^0(\vec{r}) d\tau} \quad (2.12.20)$$

alırıq. Məxrəcdəki ifadə (2.12.15)-dən məlumdur. Sürəti hesablayaq:

$$\begin{aligned} \bar{I} &= \int \psi^{0*}(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_{\alpha}(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \right] \psi^0(\vec{r}) d\tau = \int \left\{ \left[\sum_{\vec{l}} e^{-i(\vec{k}\vec{l})} \psi_{\alpha}^*(\vec{r} - \vec{l}) \right] \times \right. \\ &\times \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_{\alpha}(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \right] \left[\sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{k}\vec{l})} \psi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{l}) \right] \left. \right\} = \left\{ \sum_{\vec{l}} e^{i(\vec{k}\vec{l})} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r} - \vec{l}) \times \right. \\ &\times \left. \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_{\alpha}(\vec{r} - \vec{n}) + W(\vec{r}) \right] \psi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{l}) \right\} d\tau \end{aligned} \quad (2.12.21)$$

Fərz edək ki,

$$\bar{l} - \vec{l} = \vec{p}; \quad \vec{r} = \vec{r}' + \vec{l}; \quad \vec{r} - \vec{l} = \vec{r}'; \quad d\tau = d\tau'; \quad \vec{n}' = \vec{n} - \vec{l}; \quad W(\vec{r}) = W(\vec{r}'); \quad (2.12.22)$$

Onda I inteqralları birqat cəmlər şəklində yazmaq olar:

$$\bar{I} = N \left\{ \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{k}\vec{p})} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}') \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta' + \sum_{\vec{n}'} V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{n}') + W(\vec{r}') \right] \psi_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) d\tau' \right\} \quad (2.12.23)$$

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta' + V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) + \left\{ \sum_{\vec{n}' \neq \vec{p}} V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{n}') + W(\vec{r}') \right\} \right] \psi_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) &= E_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) + \\ + \left\{ \sum_{\vec{n}' \neq \vec{p}} V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{n}') + W(\vec{r}') \right\} \psi_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) & \end{aligned} \quad (2.12.24)$$

olduğunu nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} \bar{I} &= N \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{k}\vec{p})} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}') \left\{ E_{\alpha} + \left\{ \sum_{\vec{n}' \neq \vec{p}} V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{n}') + W(\vec{r}' - \vec{p}) \right\} \right\} \psi_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) d\tau' = \\ &= N E_{\alpha} \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{k}\vec{p})} S_{\alpha} + N \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{k}\vec{p})} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}') \left\{ \sum_{\vec{n}' \neq \vec{p}} V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{n}') + W(\vec{r}') \right\} \psi_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{p}) d\tau'. \end{aligned} \quad (2.12.25)$$

yaza bilərik. İkinci fırlananda $\vec{p} = 0$ olan həddi ayırırıq, onu C ilə işarə edək:

$$C = \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}') \left\{ \sum_{\vec{n}' \neq 0} V_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{n}') + W(\vec{r}') \right\} \psi_{\alpha}(\vec{r}') d\tau' \quad (2.12.26)$$

C kəmiyyəti sahənin özünə uzlaşan xarakterini nəzərə almaqla hər hansı atom üçün elektronun ortalaşmış potensial enerjisini ifadə edir. İndi \bar{I} üçün ifadəni aşağıdakı kimi göstərmək olar:

$$\bar{I} = NE_0 \sum_p e^{i(k\bar{p})} S_p + NC + N \sum_p e^{i(k\bar{p})} \int \psi_0^*(\bar{r}') \times$$

$$\times \left[\sum_{\bar{r}' \neq \bar{p}} V_0(\bar{r}' - \bar{n}') + W(\bar{r}') \right] \psi_0(\bar{r}' - \bar{p}) d\tau' \quad (2.12.27)$$

$$\int \psi_0^*(\bar{r}') \left[\sum_{\bar{r}' \neq \bar{p}} V_0(\bar{r}' - \bar{n}') + W(\bar{r}') \right] \psi_0(\bar{r}' - \bar{p}) d\tau' = A(\bar{p}) \quad (2.12.28)$$

kimi işarə edək.

$A(\bar{p})$ - mübadilə enerjisidir və onun yaranma səbəbi hər bir elektronun istənilən nüvənin ətrafında ola bilməsi ehtimalıdır. Bu özünü onda biruzə verir ki, $A(\bar{p})$ -nin meydana çıxmasında bir-birindən $|\bar{p}|$ məsafədə yerləşən iki atomun dalğa funksiyası iştirak edir. Başqa sözlə, bir-birindən $|\bar{p}|$ məsafədə yerləşən iki nüvə elektron mübadiləsi edə bilir. Aydındır ki, $A(\bar{p})$ mübadilə enerjisi yalnız $|\bar{p}|$ -nin kiçik qiymətlərində əhəmiyyət kəsb edir. Atom dalğa funksiyaları eksponensial xarakterə malik olduqlarından $|\bar{p}|$ -nin böyük qiymətlərində $A(\bar{p}) \approx 0$ olur. Fiziki mənaca bu o deməkdir ki, mübadilə yalnız ən yaxın atomlar arasında baş verir. İstənilən hər hansı iki atom qonşu atomların ardıcıl mübadiləsi yolu ilə elektron mübadiləsinə girir. Başqa sözlə, elektronlar ayrı-ayrı atomlar ətrafında lokallaşmışlar, onlar mübadilə yolu ilə bir atomdan digərinə keçərək kristal boyu sərbəst yerdəyişmədə olurlar. Bundan başqa qeyd etmək lazımdır ki, $A(\bar{p})$ -nin meydana çıxmasında əsas rolu istənilən nüvənin ətrafında əhəmiyyət kəsb edən qiymətə çatan $W(\bar{r})$ periodik sahəsi oynayır, eyni zamanda $\bar{n}' \neq 0$ və $\bar{n}' = \bar{p}$ olduqda $V_0(\bar{r}' - \bar{n}')$ «mübadilə edən» nüvələr ətrafında çox kiçik qiymətə malik olur.

I -nin ifadəsini nəzərə alaraq $E^{(1)}$ enerjisini

$$E^{(1)} = \frac{N[E_0 \sum_p e^{i(k\bar{p})} S_p - C - \sum_p e^{i(k\bar{p})} A(\bar{p})]}{N \sum_p e^{i(k\bar{p})} S_p} =$$

$$= E_0 - C \left[\sum_p e^{i(k\bar{p})} S_p \right]^{-1} - \frac{\sum_p e^{i(k\bar{p})} A(\bar{p})}{\sum_p e^{i(k\bar{p})} S_p} \quad (2.12.29)$$

kimi ifadə edə bilərik. Buradan görünür ki, birinci yaxınlaşmada atomlar sisteminin elektronlarının enerjisi, izolə olunmuş atomun elektronunun enerjisinə (E_0) bərabərdir. Atomlar bir-birinə yaxınlaşdıqda (yəni elektronların digər atomların nüvələri və elektronları ilə qarşılıqlı təsirini nəzərə aldıqda) enerji səviyyələri C kəmiyyəti qədər enir

və hər hansı enə malik zolağa parçalanır. $\bar{p} \neq 0$ olduqda $S_p \approx 0$ olduğunu nəzərə alsaq, yaza bilirik:

$$E^{(i)} = E_a - C - \sum_p e^{i(\bar{p})} A(\bar{p}) \quad (2.12.30)$$

Sadə misal kimi kubik qəfəsə baxaq. Belə qəfəsdə hər bir atom aşağıdakı koordinatlara malik altı ən yaxın qonşuya malikdir:

$$\bar{P} = a \begin{Bmatrix} (1,0,0) & (-1,0,0) \\ (0,1,0) & (0,-1,0) \\ (0,0,1) & (0,0,-1) \end{Bmatrix} \quad (2.12.31)$$

Mübadilə enerjisini izotrop qəbul etsək: $A(\bar{p}) = A(|\bar{p}|) = A$ və daha uzaq atomlarla elektron mübadiləsini nəzərə almasaq (2.12.30) -dan

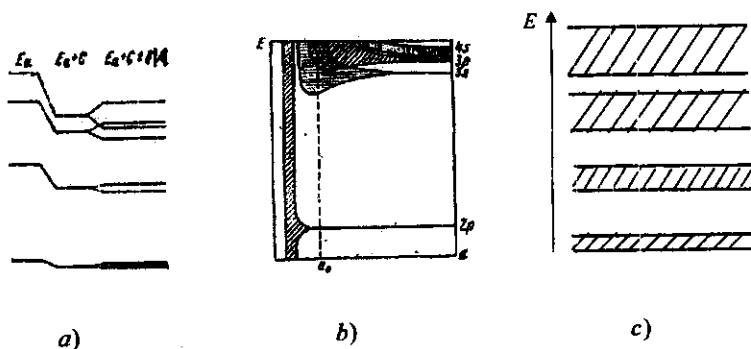
$$E^{(i)} = E_a - C - A \sum_{k=1}^6 e^{i(\bar{k}_k)} = E_a - C - A(e^{i k_x a} + e^{-i k_x a} + e^{i k_y a} + e^{-i k_y a} + e^{i k_z a} + e^{-i k_z a}) = \quad (2.12.32)$$

$$= E_a - C - 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) = E(\bar{k})$$

Buradan görünür ki, enerji \bar{k} dalğa vektorundan kvazikəsilməz asılı olub, E_{\max} və E_{\min} qiymətləri arasında dəyişir:

$$\begin{aligned} E_{\max} &= E_a - C + 6|A|, \\ E_{\min} &= E_a - C - 6|A|. \end{aligned} \quad (2.12.33)$$

Beləliklə, kristal əmələ gələrkən atomların qarşılıqlı təsiri nəticəsində izolə olunmuş atomun E_a -enerjisi C kəmiyyəti qədər aşağı enir və eni $12|A|$ -ya bərabər (sadə kubik qəfəs üçün) zonaya və ya zolağa parçalanır. Enerji zonaları enerjinin qadağan intervalları-qadağan zonaları ilə bir-birindən ayrılırlar (şək. 2.15).



Şəkil 2.15 Atomlar bir-birinə yaxınlaşarkən enerji səviyyələrindən enerji zonalarının əmələ gəlməsi
Zonanın eni mübadilə enerjisinin qiymətindən asılıdır.

$$\Delta E = |E_{\text{max}} - E_{\text{min}}| = 12|A|$$

Digər tərəfdən A -nın qiyməti qonşu atomların dalğa funksiyalarının bir-birini örtmə oblastından asılıdır. Enerji səviyyələri dərin olduqca (səviyyələrin sıra nömrəsi kiçildikcə) qonşu atomların dalğa funksiyalarının bir-birini örtmə oblastı azalır, bununla bərabər, onlar arasındakı mübadilə enerjisi və deməli, enerji zonasının eni də kiçilir. Buradan görünür ki, **daxili elektron təbəqələrinin enerji səviyyələri xarici elektron təbəqələrininkinə nisbətən daha kiçik parçalanmaya məruz qalırlar, belə ki, daxili təbəqələrin elektronları fəzanın daha kiçik ölçülü oblastlarında lokallaşırırlar.** Şək. 2.15-də atom səviyyələrindən enerji zonalarının yaranma sxemi göstərilmişdir. Bu şəkildən görüldüyü kimi **enerjinin artması ilə icazəli zonaların eni artır, qadağan zonalarının eni isə azalır. Səviyyə nə qədər yüksəkdə yerləşirsə, o, daha çox aşağı enir və daha geniş zonaya parçalanır.**

Şək. 2.15-də atomların bir-birinə yaxınlaşması və kristal əmələ gətirməsi zamanı səviyyələrin zonalara parçalanması göstərilmişdir. a_0 -real kristal qəfəsin periodudur.

Tetraqonal və ya rombik kristallik sistemlər üçün müxtəlif istiqamətlərdə atomlararası məsafələr də müxtəlifdir, ona görə də mübadilə inteqralı da istiqamətdən asılı ola bilər. Qonşu atomların \vec{p} koordinatlarını aşağıdakı kimi işarə edək:

$$\vec{p} = \left\{ \begin{array}{ll} (a_1, 0, 0) & (-a_1, 0, 0) \\ (0, a_2, 0) & (0, -a_2, 0) \\ (0, 0, a_3) & (0, 0, -a_3) \end{array} \right\} \quad (2.12.34)$$

Bu istiqamətlərə müvafiq mübadilə inteqrallarını A_1, A_2 və A_3 -lə işarə etsək,

$$E(\vec{k}) = E_0 - c - 2(A_1 \cos k_x a_1 + A_2 \cos k_y a_2 + A_3 \cos k_z a_3) \quad (2.12.35)$$

alırıq. $dE(\vec{k})/d\vec{k} = 0$ qəbul edərək ekstremal nöqtələri tapa bilərik. Asanlıqla müəyyən etmək olur ki, enerjinin ekstremumları $k_{0i} = 0$ və $k_{0i} = \pm\pi/a_i$, yəni Brilliyen zonalarının mərkəzində və təpələrində yerləşir. \vec{k}_0 -nöqtələrinə nəzərən $E(\vec{k})$ -ni Teylor sırasına ayıraraq, ümumi halda

$$E(\vec{k}) = E_{\text{ext}} + \frac{1}{2} \frac{d^2 E}{d\vec{k}^2} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + \dots \quad (2.12.36)$$

və ya

$$E(\vec{k}) = E_0 - C - 2 \sum_{i=1}^3 A_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{m_i} k_i^2 \quad (k_{0i} = 0) \quad (2.12.37)$$

və

$$E(\vec{k}) = E_0 - C - 2 \sum_{i=1}^3 A_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{m_i} \left(k_i \pm \frac{\pi}{a_i} \right)^2 \left(k_{ei} = \pm \frac{\pi}{a} \right) \quad (2.12.38)$$

alırıq. Effektiv kütlə aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$m^{-1} = \pm \begin{pmatrix} \frac{2A_1 a_1^2}{\hbar^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2A_2 a_2^2}{\hbar^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2A_3 a_3^2}{\hbar^2} \end{pmatrix} \quad (2.12.39)$$

burada «-» işarəsi $k_0 = 0$, «+» - isə $(\pm \pi/a_1; \pm \pi/a_2; \pm \pi/a_3) = \pi(b_1, b_2, b_3)$ nöqtələrinə uyğundur.

Effektiv kütlənin işarəsi mübadilə enerjisinin işarəsi ilə təyin olunur. $A_i > 0$ olarsa, Brilliyen zonasının mərkəzində enerjinin maksimum, təpə nöqtələrində isə minimum qiymətləri yerləşir. $A_i < 0$ olduqda isə Brilliyen zonasının mərkəzində minimum, təpə nöqtələrində isə enerjinin maksimumları yerləşəcəkdir. $E(\vec{k})$ -nin analitik asılılığından bilavasitə görüldüyü kimi, enerji həqiqətən də $(\vec{k} - \vec{k}_0)$ -in kvadratik funksiyası olub, $2\pi b$ periodikliyinə malikdir.

Effektiv kütlə tenzorunun komponentləri maksimum və minimum nöqtələrdə modulca eyni olub, yalnız işarəcə bir-birindən fərqlənirlər. Başqa sözlə, eyni zonanın maksimumu və minimumu ətrafında izoenergetik səthlərin formaları eynidir. **Effektiv kütlə tenzorunun komponentləri mübadilə enerjisi ilə tərs mütənasibdir:**

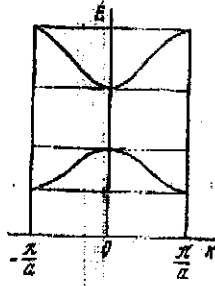
$$m_i = \pm \frac{\hbar^2}{2a_i^2 A_i} \quad (2.12.40)$$

Mübadilə enerjisi icazəli zonaların enini müəyyən etdiyindən, söyləmək olar ki, **effektiv kütlə enerji zonalarının eni ilə tərs mütənasibdir. Buradan məlum olur ki, enerji zonası nə qədər yüksəkdə yerləşirsə, ondakı yükdaşıyıcıların effektiv kütlələri də bir o qədər kiçik olur.**

Ekstremum ətrafındakı izoenergetik səthlər ellipsoidlər şəklində olurlar, məsələn, $A_i < 0$ ($k_0 = 0$) üçün

$$E(\vec{k}) = E_{\min} + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} + \frac{k_z^2}{m_z} \right). \quad (2.12.41)$$

Kubik t p  n qt l rin  uyğun olaraq, bu halda maksimumların sayı s kizdir. Amma h r bir t p d  qurulmuş izoenergetik s thnin yalnız 1/8 hissəsi birinci Brilliy n zonasına m xsus olduėundan, birinci zonaya yalnız bir tam ellipsoid d ş r. Bu amil enerji zonasında hal sıxlığının hesablanmasında m h m rol oynayır.



Şek. 2.16. $A > 0$ v  $A < 0$ olan hallar  c n dalėa vektoru il  enerji arasında  laq 

Sad  kubik q f s  c n m badil  enerjisi izotropdur: $A(\vec{p}) = A(|\vec{p}|)$, ona g r  d  effektiv k tl  skalyardır:

$$m^* = \pm \hbar^2 / (2a^2 A) \quad (2.12.42)$$

Bu halda ekstremum  trafında izoenergetik s thl r sferik formalı olurlar. Şek. $E(\vec{k})$ -nin qrafiki g st rilmişdir. Enerji s thl ri (şek .2.16)-da olduėu kimidir.

Qadaėan zonasının enini araşdıraraq. Qadaėan zonasına n v  $(n+1)$ -ci enerji zonaları arasındakı minimum m saf  kimi baxaraq, onu

$$\Delta E_0 = E_{(n+1)\min} - E_{n\max} \quad (2.12.43)$$

kimi t yin ed  bil rik. İki enerji zonasının ekstremumu  c n (2.12.37) v  (2.12.38) ifad l rindən istifad  ed r k,

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= \left[E_{a(n+1)} - C_{(n+1)} - 2 \sum_{i=1}^n |A_{i(n+1)}| \right] - \left[E_n - C_n + 2 \sum_{i=1}^n |A_{in}| \right] = \\ &= [E_{a(n+1)} - E_n] + [C_n - C_{(n+1)}] - 2 \sum_{i=1}^n (|A_{i(n+1)}| + |A_{in}|) \end{aligned} \quad (2.12.44)$$

alırıq. Bu n tic  çox  yanidir. Sad lik  c n $C_{n+1} \approx C_n$ q bul ed k. Bu halda qadaėan zonasının eni $E_{a(n+1)} - E_n$ f rqiindən qonşu enerji zonalarının yarımenl ri c mi ki ik olur. Enerjinin artması il  qonşu zonalar arasındakı m saf  ki ildiėi zonaların eni is  b y d y nd n, enerjinin artımı il  qa-

dağan zonasının eni azalır. Bu nəticə eyni qrup elementlərinin sıra nömrəsinin artımı ilə qadağan zonasının eninin azalmasının izahının əsasında durur. Məsələn, almaz, silisium, germanium, boz qalayın valent zonası ilə ən yaxın sərbəst zonası arasındakı enerji fərqi-qadağan zonasının eni və bu ardıcılıqla kiçilməlidir və bu təcrübə ilə tam uyğun gəlir.

Yalnız ən yaxın qonşu atomlarla qarşılıqlı təsiri nəzərə almaqla, həcmə mərkəzləşmiş kubik kristal qəfəs üçün enerjinin kvaziimpulsdan asılılığına baxaq. Kubik tillərini a ilə işarə edib, koordinat başlanğıcını mərkəzdəki atomla üst-üstə salsaq, kubik təpə nöqtələrindəki atomların koordinatları aşağıdakı kimi olar:

$$\vec{p} = \frac{a}{2} \left\{ \begin{array}{ll} (1,1,1) & (-1,-1,-1) \\ (-1,1,1) & (1,-1,-1) \\ (1,-1,1) & (-1,1,-1) \\ (1,1,-1) & (-1,-1,1) \end{array} \right\} \quad (2.12.45)$$

(2.12.45)-i (2.12.30)-da nəzərə alsaq:

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= E_0 - C - 2A[\cos(k_x + k_y + k_z) \frac{a}{2} + \cos(-k_x + k_y + k_z) \frac{a}{2} + \\ &+ \cos(k_x - k_y + k_z) \frac{a}{2} + \cos(k_x + k_y - k_z) \frac{a}{2}] = \\ &= E_0 - C - 8A \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \end{aligned} \quad (2.12.46)$$

alırıq. Buradan ekstremal nöqtələr üçün

$$\begin{aligned} E_{\min} &= E_0 - C - 8A \\ E_{\max} &= E_0 - C + 8A \end{aligned} \quad (2.12.47)$$

alınır ki, bu da qadağan zonasının eni üçün

$$\Delta E_0 = E_{\max} - E_{\min} = 16A \quad (2.12.48)$$

qiymətini verir.

Səthə mərkəzləşmiş qəfəs üçün də enerjinin dalğa vektorundan asılılığı analoji qayda ilə verilir:

$$\vec{p} = \frac{a}{2} \left\{ \begin{array}{lll} (1,1,0) & (1,0,1) & (0,1,1) \\ (-1,1,0) & (1,0,-1) & (0,-1,1) \\ (1,-1,0) & (-1,0,1) & (0,1,-1) \\ (-1,-1,0) & (-1,0,-1) & (0,-1,-1) \end{array} \right\} \quad (2.12.49)$$

Əvvəldə olduğu kimi, mübadilə enerjisini izotrop qəbul edərək, enerjinin ifadəsi üçün

$$\begin{aligned}
E(\vec{k}) &= E_0 - C - 2A \left[\cos(k_x + k_y) \frac{a}{2} + \cos(k_x - k_y) \frac{a}{2} + \cos(k_x + k_z) \frac{a}{2} + \right. \\
&\quad \left. + \cos(k_x - k_z) \frac{a}{2} + \cos(k_y + k_z) \frac{a}{2} + \cos(k_y - k_z) \frac{a}{2} \right] = \\
&= E_0 - C - 4A \left[\cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} + \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_z}{2} + \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2} \right]
\end{aligned} \tag{2.12.50}$$

alınq. Aşkarlıq üçün $A > 0$ götürsək, Brilliyen zonasının mərkəzində qiyməti

$$E_{\max} = E_0 - C + 12A \tag{2.12.51}$$

olan enerji maksimumu yerləşər. Kosinusların cüt-cüt hasiləri -1 -ə bərabər ola bilmədiyindən, enerjinin minimumu $E_{\min} = E_0 - C - 12A$ ola bilməz. (2.12.51) ifadəsinin ekstremumluq şərtini yazıb, həll etsək,

$$E_{\min} = E_0 - C - 4A \tag{2.12.52}$$

alınq ki, buradan da qadağan zonasının eni üçün $24A$ deyil,

$$\Delta E_0 = E_{\max} - E_{\min} = 16A \tag{2.12.53}$$

alınq.

Atom səviyyələrinin cırlaşması məsələsinə nəzər salaraq, qeyd etmək olar ki, enerjinin s -səviyyəsi sadə, qalan səviyyələr isə cırlaşmışdır. Spini nəzərə almadan cırlaşma faktoru $g(2l+1)$ -dir, burada l - orbital kvant ədədidir. Ona görə də p -səviyyələri üçqat, d -səviyyələri - beşqat və s . cırlaşmaya məruz qalırlar. Orbital və spin maqnit momentlərinin qarşılıqlı təsiri nəticəsində enerji səviyyələri incə quruluşa malikdirlər.

Enerji səviyyələri cırlaşmış olduqda kristalda elektronun dalğa funksiyası atom hallarını cırlaşmış olmasını nəzərə almaqla yazılmalıdır:

$$\psi^n(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}, \alpha} e^{i(\vec{k}\vec{n})} c_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{n}), \tag{2.12.54}$$

burada c_{α} -naməlum əmsəldir, α isə g sayda müxtəlif qiymətlər alır. Dalğa funksiyasının bu ifadəsini (2.12.19)-da yerinə yazıb, E -enerjisini hesablamaq olar. Bu zaman əvvəlkindən fərqli olaraq hər bir dalğa funksiyası üçün hesablasaq integralın qiyməti fərqli alınır. Bunun nəticəsində cırlaşma, qismən və ya tamamilə aradan qalxır və p - zonası üçün üç müxtəlif $E(\vec{k})$ enerji qanadı almaq mümkün olur.

§ 2.13. Xarici sahələrin kristalın enerji spektrinə təsiri (effektiv kütlə metodu)

Kristala xarici sahə $V(\vec{r})$ təsir edən hal üçün Şredinger tənliyinin həlli-nə baxaq:

$$\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.13.1)$$

Bu tənliyi həll etmək üçün $U(\vec{r})$ sahəsi verilməlidir, amma o, mə-lum deyil. Effektiv kütlə metodu adlanan metodla bu tənliyin rahat və ki-fayət qədər dəqiq həlli mövcuddur. Bunu anlamaq üçün yenə ideal kristal üçün Şredinger tənliyinin həllini nəzərdən keçirək. Mələrn olduğu kimi, ideal kristalda elektronun dalğa funksiyası Blox funksiyası $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ olub, enerjisi isə ekstremum ətrafında kvaziimpuls və ya dalğa vektorunun kvadratik funksiyasıdır:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) \right] \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k})\psi_{\vec{k}}(\vec{r}); \\ E(\vec{k}) &= E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m^*}(\vec{k} - \vec{k}_0)^2. \end{aligned} \quad (2.13.2)$$

Kütləsi elektronun effektiv kütləsi ilə üst-üstə düşən sərbəst zər-rcəyiin

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta \quad (2.13.3)$$

hamiltonianına baxaq:

$$\hat{H}_0 \tilde{\psi}_0 = \tilde{E}_0 \tilde{\psi}_0 \quad (2.13.4)$$

Şredinger tənliyini həll edək. \hat{H}_0 -in yerinə onun ifadəsini yazsaq alarıq:

$$\sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \tilde{\psi}_0 + \frac{2E_0}{\hbar^2} \tilde{\psi}_0 = 0 \quad (2.13.5)$$

Bu tənlikdə

$$\tilde{\psi}_0 = Ae^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} \quad (2.13.6)$$

ifadəsini yazmaqla əmin olmaq olar ki, $\hat{\psi}_0$ (2.13.4) və (2.13.5) tənlikləri-nin həllidir, eləcə də

$$\tilde{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\alpha^2}{m_1} + \frac{\beta^2}{m_2} + \frac{\gamma^2}{m_3} \right) \quad (2.13.7)$$

(2.13.7) ilə (2.13.2)-ni müqayisə edərək, görürük ki, (2.13.4) tənliyi, əgər α, β və γ əmsallarını

$$\alpha = k_x - k_{0x}; \quad \beta = k_y - k_{0y}; \quad \gamma = k_z - k_{0z} \quad (2.13.8)$$

kimi seçsək və enerjinin hesablamaya başlanğıcını ekstremum nöqtəsi üzərində salsaq, yəni $E(\vec{k}_0) = 0$ qəbul etsək, (2.13.2) tənliyi ilə eyni enerji spektrinə malik olur. Ümumi halda

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E(\vec{k}_0) \quad (2.13.9)$$

hamiltonianı ekstremum ətrafında qəfəs sahəsinin hamiltonianı ilə eyni enerji spektrinə malikdir. Onun məxsusi dalğa funksiyaları isə

$$\tilde{\psi}_0(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0, \vec{r})}$$

şəklindədir. Beləliklə, **kristal daxilində zərrəciyin hərəkəti sərbəst zərrəciyin hərəkətinə oxşardır. Həqiqi sərbəst zərrəciklə kristaldakı zərrəcik arasındakı fərq onların kütlələrindədir: sərbəst zərrəciyin kütləsinin əvəzinə effektiv m^* -kütləsindən istifadə etmək lazımdır.**

Xarici $V(\vec{r})$ sahəsi əlavə olunduqda (2.13.1) Şredinger tənliyi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.13.11)$$

kimi yazıla bilər. Bu tənliyi həll edərək, xarici sahədə yerləşən kristalda elektronun E enerjisinin qiymətlərini və $\psi(\vec{r})$ dalğa funksiyasını tapırıq. **Bu məsələnin (2.13.11) tənliyi əsasında həlli effektiv kütlə metodu adını almışdır. Onun ümumi (2.13.1) tənliyinə nəzərən üstünlüyü ondadır ki, biz qəfəsin qeyri-məlum $U(\vec{r})$ sahəsi əvəzində zərrəciyin eksperimentdən tapılan m^* -effektiv kütləsindən istifadə edə bilirik.**

Bu metodun çatışmazlığı onun təqribi xarakterə malik olmasıdır, belə ki, o, yalnız ekstremum nöqtəsi ətrafındakı nöqtələrdə məna kəsb edir.

Xarici sahənin təsiri ilə ideal kristalın enerji spektrində yaranan dəyişikləri tapmaq üçün adi həyəcanlanma nəzəriyyəsindən deyil, kvant hərəkət tənliyindən istifadə edək. **Zamandan aşkar şəkildə asılı olmayan \hat{L} operatorlu ixtiyari fiziki kəmiyyət üçün kvant hərəkət tənliyi**

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{L} \right] = \frac{1}{i\hbar} \left(\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L} \right) \quad (2.13.12)$$

kimidir. Bu tənliyi ideal kristalın hamiltonianı ilə yazılmış tənliyə tətbiq edək

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r});$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial t} &= \left[\hat{H}, \hat{H}_0 \right] = \left[\hat{V}, \hat{H}_0 \right] = \left[\hat{V}, \hat{T} \right] = \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) \left\{ \Delta \hat{V} - \hat{V} \Delta \right\} = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left\{ (\Delta V) + 2(\nabla V, \nabla) \right\}. \end{aligned} \quad (2.13.13)$$

Fəzada zəif dəyişən sahələr üzərində dayanaq, belə sahələr üçün ikinci toplanana nəzərə ΔV kəmiyyətini nəzərə almaya bilərik. $(\nabla V) = -\vec{F}_a$,

$$-\frac{i\hbar}{m} \nabla = \frac{\hat{p}}{m} = \hat{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} \quad (2.13.14)$$

olduğunu nəzərə alaraq yazı bilərik

$$\frac{d\hat{H}_0}{dt} = \left(\vec{F}_a, \frac{d\vec{r}}{dt} \right). \quad (2.13.15)$$

Bu ifadəni ilkin $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyalı hallar üzrə ortalaşdıraraq. \vec{F}_a -nın koordinatdan asılı olmadığını qəbul edərək, onu inteqral altından çıxarsaq

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\hat{H}_0}{dt} \right\rangle &= \frac{d}{dt} \int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \hat{H}_0 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\tau = \frac{dE_0(\vec{k})}{dt} = \\ &= \int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) \left(\vec{F}_a, \hat{v} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\tau = \left(\vec{F}_a, \langle \vec{v} \rangle \right). \end{aligned} \quad (2.13.16)$$

(2.13.16) - klassik tənlikdir və o, göstərir ki, $E_0(\vec{k})$ «tam» enerjisi xarici \vec{F}_a qüvvəsinin gördüyü işin nəticəsində zaman keçdikcə dəyişir. Onu

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_a = -\nabla V \quad (2.13.17)$$

hərəkət tənliyindən almaq olar. Bu tənliyin hər tərəfini $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ sürətinə skalyar vuraq

$$\left(\vec{v}, \frac{d\vec{p}}{dt} \right) = \left(\frac{\vec{p} - \vec{p}_0}{m}, \frac{d\vec{p}}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \frac{(\vec{p} - \vec{p}_0)^2}{2m} = \frac{d}{dt} E_0(\vec{p}) = -\frac{dV}{d\vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} = -\frac{dV}{dt} \quad (2.13.18)$$

və ya

$$E_0(\vec{p}) + V(\vec{r}) = H_0(\vec{p}, \vec{r}) = const \quad (2.13.19)$$

alırıq. $H_0(\vec{p}, \vec{r})$ -lə biz xarici $V(\vec{r})$ potensial sahəsi əlavə olunmuş kristaldakı elektronun zamana görə dəyişməyən Hamilton funksiyasını işarə et-

mişik. (2.13.19) məhz (2.13.11) tənliyinə uyğundur və buna görə effektiv kütlə metodu ciddi kvantomekaniki əsas kəsb edir.

Qeyd edək ki, xarici sahənin təsiri altındakı kristalda zərrəciyin hərəkəti zamanı onun H_0 -tam enerjisi saxlanılır, $E_0(\vec{p})$ və $V(\vec{r})$ isə əks istiqamətlərdə dəyişirlər. Amma əgər $V(\vec{r})$ istənilən hədudlarda dəyişə bilirdiyi halda, $E_0(\vec{p})$ yalnız enerji zonasının E_{\min} -dan E_{\max} -ma qədərki hədudlarında dəyişə bilər. Onda buradan məlum olur ki, $V(\vec{r})$ -in dəyişməsi də eyni intervalla məhdudlaşır, həqiqətən də (2.13.19) tənliyinin sol və sağ tərəflərini diferensiallayaraq, alırıq

$$dE_0 + dV = 0, \text{ və ya } \delta E_0 + \delta V = 0 \quad (2.13.20)$$

$\delta E_0 = E_{\max} - E_{\min}$ qəbul edərək, alırıq

$$\delta V = -\delta E_0 = E_{\min} - E_{\max} \quad (2.13.21)$$

Bu münasibətdən həmçinin alınır ki, bircins elektrik sahəsində elektron uzunluğu

$$\delta V = -(\delta \vec{r} \vec{F}_a) = -(E_{\max} - E_{\min}) \quad (2.13.22)$$

olan hissədə sahə boyu periodik rəqsi hərəkət etməlidir. Buradan

$$\delta_r = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{F_a} = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{eE} \quad (2.13.23)$$

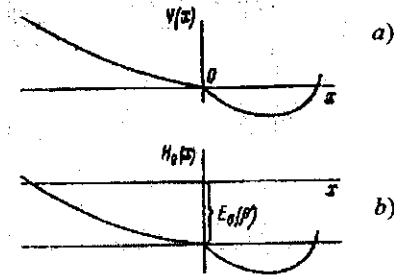
alınır. (2.13.19) tənliyinə qayıdaq. $\vec{p} = \vec{p}'$ qiymətini fiksə edib, H_0 Hamilton funksiyasını koordinatların dəyişməsi ilə mümkün qiymətlərinə baxaq. $E_0(\vec{p})$ koordinatdan asılı olmadığından, H_0 -in \vec{r} -dən asılılığı $V(\vec{r})$ xarici sahəsi ilə müəyyən olunur. (şək.2.17a). Şək. 2.17 b-yə $E_0(\vec{p}')$ enerjisinin koordinatdan asılılığı kimi baxmaq olar. İndi əgər $E_0(\vec{p}')$ enerjisinin bütün mümkün qiymətlərini versək, enerji zonasının koordinatdan asılılıq qrafikini alarıq (şək 2.18).

Beləliklə, $H_0(\vec{r})$ - Hamilton funksiyasının qrafikini xarici sahənin təsiri ilə enerji zonalarının əyilməsi kimi də interpretasiya etmək olar. Belə interpretasiya ona görə rahatdır ki, bu elektronun həm sərbəst, həm də səpilmə ilə hərəkətini nəzərdən keçirməyə imkan verir. (2.13.19) tənliyi ilə təsvir olunan «sərbəst» hərəkətə baxaq.

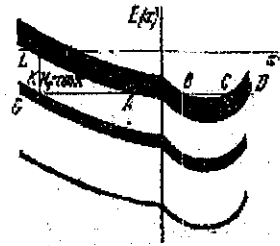
Xarici $V(\vec{r})$ sahəsinin təsiri altında elektronun hərəkəti zamanı onun tam enerjisi saxlanılır: $H_0 = const$. Şək. 2.17-də bu absis oxuna paralel xətlə göstərilmişdir.

Bu şəkildən görüldüyü kimi zonanın bir səviyyəsindən digərinə kristalda periodik hərəkətdə olaraq keçir. Elektron eyni bir $H_0 = const$ tam enerjiyə

malik olmaqla iki zonanın $A-B, C-D$ və $G-K$ nöqtələri arasında periodik rəqsi hərəkətdə ola bilər. (2.13.23) tənliyinə müvafiq



Şek. 2.17. Potensial enerjinin qiymətinin və Hamilton funksiyanın koordinatdan asılılığı



Şek. 2.18. Zonalarda elektronun enerjisinin koordinatdan asılılığı

olaraq zonalarnın meyli nə qədər çox ($C-D$ və $A-B$ -nin müqayisəsindən) enerji zonalarnının eni nə qədər az ($A-B$ və $G-K$ -nin müqayisəsindən) olarsa, δ , oblastlarının ölçüləri də o qədər kiçik olar. Bununla bərabər, elektron $G-K$ parçasının nöqtələrindən $A-B$ parçasının nöqtələrinə keçə bilər və bununla o, ikinci zonadan üçüncüyə və s. daha «yüksək» enerji zonalarnına keçə bilər. Belə keçidlə tunel effekti hesabına mümkündür - k nöqtəsindən A nöqtəsinə keçid üçbucaqlı KLA potensial çəpərindən keçməklə mümkündür. Kvant mexanikasından məlum olduğu kimi tunel keçidinin ehtimalı potensial çəpərin eni və hündürlüyü ilə eksponensial əlaqədədir. Potensial çəpərin KL hündürlüyü ΔE_0 qadağan zonasının enidir. Çəpərin eni KA öz növbəsində potensial çəpərin KL hündürlüyü və zonanın meyliindən asılıdır, bu isə F_a qüvvəsi, eləcə də sahənin \bar{E} intensivliyi ilə müəyyən olunur:

$$KA = \frac{KL}{F_a} = \frac{\Delta E_0}{|e\bar{E}|} \quad (2.13.24)$$

Beləliklə, belə nəticəyə gəlik ki, üçbucaqlı potensial çəpərin şəffaflığı $\exp\left\{\gamma \frac{\Delta E_0^{3/2}}{|\bar{E}|}\right\}$ ilə mütənəsbdir, yəni zonadan zonaya tunel keçidinin ehtimalı enerji zonalarnının meylinə gətirən xarici elektrik sa-

həsinin \bar{E} intensivliyinin artması ilə artır. k - nöqtəsindən A nöqtəsinə keçid ehtimalı, A nöqtəsindən k nöqtəsinə keçid ehtimalına bərabərdir, ona görə də hansı zonada elektronların konsentrasiyası böyükdürsə, o zonadan elektronların konsentrasiyası nisbətən az olan digər zonalara olan keçidlərin sayı daha çox olur. Xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə aşağıdakı dolu zonadan olan keçidlər hesabına yuxarı sərbəst zonada elektronların sayının kəskin artması Ziner effekti adlanır.

BC hissəsində də tunel effekti baş verə bilər. İndi $V(\bar{r})$ elektronun sahəsində əldə etdiyi enerjinin, məsələn, qəfəse verdiyi halda onun, «qeyri-sərbəst» hərəkətinə baxaq. Bu halda elektron zonanın eyni bir səviyyəsində qalmaqla kristal boyu istənilən məsafəyə yerini dəyişə bilər.

§ 2.14. Lokallaşmış hallar

Keçirici elektronların hərəkətini öyrənərkən hərdən elə hallar yaranır ki, elektrona kristalın periodik sahəsindən başqa hər hansı bir əlavə sahə də təsir edir. Məsələn, kristalın ideal qəfəsinə kənar atom və ya ion (aşqar atomu və ya ionu) daxil edildikdə belə vəziyyət yaranı bilər. Kristalın sərbəst səthinin mövcudluğu da səth yaxınlığında çevik dəyişən hər hansı əlavə sahənin mövcudluğuna ekvivalentdir. Əgər səth elektrik yüklüdürsə, onda onun yaxınlığında yavaş dəyişən elektrik sahəsi olur. Elektrona təsir edən dəyişin kulon sahəsi eksiton adlanan elektron və dəyişin bağlı vəziyyətini yaradır. İon kristalının polyarizasiyası elektronun kristala təsiri ilə yaranan əlavə sahənin -- polyaron vəziyyətinin əmələ gəlməsinə səbəb olur. Nəhayət, qəfəs atomlarının istilik rəqsləri ideal qəfəsin periodik sahəsinin təhrifinə, başqa sözlə, elektrona təsir edən hər hansı əlavə potensialın yaranmasına gətirib çıxarır.

Həyəcanlanmış periodik sahələrdə elektronun hərəkətinə dair kvantomekaniki məsələlərə bir sıra müəlliflər (Pekar, 1946, Sleter, 1949, Adams, 1952, Lyüttinger və Kon, 1955) tərəfindən baxılmışdır.

Fərz edək ki, kristalın periodik sahəsinə «mərkəzi» \bar{R} koordinatlı nöqtədə yerləşən kristalın kiçik oblastında lokallaşan kifayət qədər güclü W həyəcanlanması əlavə olunmuşdur. Onu $W(\bar{r} - \bar{R})$ ilə işarə edək. Şredinger tənliyini

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\bar{r}) + W(\bar{r}) \right] \psi(\bar{r}) = E\psi(\bar{r}) \quad (2.14.1)$$

və ya

$$\left[\hat{H}_0 + \hat{W} \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.14.2)$$

şəklində yazmaq olar. $\psi(\vec{r})$ funksiyasını $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ Blox funksiyaları ilə ifadə edib

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.14.3)$$

onu (2.14.2) tənliyində nəzərə alsaq

$$\sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \left[E_0(\vec{k}) + \hat{W} \right] \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.14.4)$$

alırıq. Bu tənliyi $\psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r})$ -ə vurub, bütün kristal üzrə inteqrallasaq, adi matris formasında yazaraq

$$c_{\vec{k}'} E_0(\vec{k}') + \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}} = E c_{\vec{k}'} \quad (2.14.5)$$

və ya

$$\left[E - E_0(\vec{k}') \right] c_{\vec{k}'} - \sum_{\vec{k}} w_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}} = 0 \quad (2.14.6)$$

alırıq. R nöqtəsinə çox yaxın ətrafındakı kiçik oblastdan başqa hər yerdə əlavə $W(\vec{r} - \vec{R})$ həyəcanlanmasını çox kiçik (sıfıra bərabər) qəbul edərək, matris elementini

$$w_{\vec{k}\vec{k}'} = \int_{(V_R)} \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) W(\vec{r} - \vec{R}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d\tau \quad (2.14.7)$$

hesablayarkən inteqrallama R -in yaxın ətrafında çox kiçik həcm üzrə aparılır. Məlum teoremə əsaslanaraq

$$w_{\vec{k}\vec{k}'} = \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{R}') \psi_{\vec{k}}(\vec{R}') \int W(\vec{r} - \vec{R}) d\tau = \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{R}') \psi_{\vec{k}}(\vec{R}') W_0 V_R, \quad (2.14.8)$$

alırıq, burada

$$W_0 = \frac{1}{V_R} \int W(\vec{r} - \vec{R}) d\tau \quad (2.4.9)$$

V_R həcmi üzrə həyəcanlanma enerjisinin orta qiymətidir.

$w_{\vec{k}\vec{k}'}$ -nın ifadəsini (2.14.6) tənliyində yerinə yazsaq

$$\left[E - E_0(\vec{k}') \right] c_{\vec{k}'} - \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{R}') W_0 V_R \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{R}') = 0 \quad (2.14.10)$$

alırıq. Amma

$$\sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{R}') = \psi(\vec{R}') \quad (2.14.11)$$

\vec{k} və \vec{k}' -dən asılı olmayan hər hansı kəmiyyətdir, ona görə də (2.14.10) və (2.14.11)-dən $c_{\vec{k}'}$ üçün

$$c_{\bar{k}'} = \frac{\psi_{\bar{k}'}(\bar{R}') W_0 V_R \psi(\bar{R}')}{E - E_0(\bar{k}')} \quad (2.14.12)$$

yaza bilərik. $c_{\bar{k}'}$ və $c_{\bar{k}}$ üçün ifadələri (2.14.10)-da yerinə yazıb, $\psi_{\bar{k}'}, \psi(\bar{R}')$ və $W_0 V_R$ -ə ixtisar edərək

$$I - \sum_{\bar{k}} \frac{\psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}') \psi_{\bar{k}}(\bar{R}') W_0 V_R}{E - E_0(\bar{k})} = 0 \quad (2.14.13)$$

və ya

$$\sum_{\bar{k}} \frac{\psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}') \psi_{\bar{k}}(\bar{R}')}{E - E_0(\bar{k})} = \frac{1}{W_0 V_R} \quad (14.14)$$

alırıq. Buradan görünür ki, sistemin həyəcanlanma enerjisinin məxsusi qiymətləri həyəcanlanma kəmiyyəti ilə $W_0 R_n$ və onun \bar{R}' nöqtəsindəki funksiyasının qiymətləri vasitəsi ilə lokallaşması ilə əlaqədardır. O, E -enerjisine nəzərən N dərəcəli cəbri tənlikdir, deməli onun N sayda kökü vardır. Əgər $W_0 V_R \rightarrow 0$ olarsa, sağ tərəf sonsuzluğa yaxınlaşar:

$1/(W_0 V_R) \rightarrow \infty$. $|\varphi_{\bar{k}}(\bar{R}')|^2 W_0 V_R$ -dən asılı olmayan sabit kəmiyyət olduğundan, onda (2.14.14) tənliyinin ödənilməsi üçün bu tənliyin toplananlarından heç olmasa birinin sonsuzluğa yaxınlaşması və ya toplananlardan birinin məxrəcinin sıfıra yaxınlaşması lazımdır, məsələn, $\bar{k} = k^*$:

$$E - E_0(\bar{k}^*) \rightarrow 0, \quad (2.14.15)$$

burada $\bar{k}^* \bar{k}$ -nu N mümkün qiymətlərindən birinə bərabər ola bilər ki, bunun hesabına E həyəcanlanmamış sistemin $E_0(\bar{k}^*)$ enerjisinin icazəli qiymətlərindən birinə bərabər ola bilər. Başqa sözlə, əgər həyəcanlanma sıfıra yaxınlaşarsa ($W \rightarrow 0$), «həyəcanlanmış» məsələnin həlli, «həyəcanlanmamış» məsələnin həllinə keçir.

Digər limit halına baxaq: $W_0 V_R \rightarrow \pm\infty$. Bu halda (2.14.14)-ün sağ tərəfi sıfıra yaxınlaşır. Bu halın tədqiqinin asanlıığı üçün $\bar{k} = \bar{k}_1; \bar{k}_2; \dots; \bar{k}_N; E_0(\bar{k}_n) = a_n; E = x$;

$$|\psi_{\bar{k}_n}(\bar{R}')|^2 = A_n; \frac{1}{W_0 V_R} = B, \quad (2.14.16)$$

işarələmələrini qəbul edək və x və B kimi iki dəyişənin funksiyasına baxaq:

$$f(x, B) = \left[\sum_{n=1}^N \frac{A_n}{x - a_n} - B \right] \prod_{i=1}^N (x - a_i) \quad (2.14.17)$$

E enerjisinin mümkün qiymətləri $f(x, B) = 0$ şərtindən təyin olunur. Bu şərt isə

$$\left[\sum_{n=1}^N \frac{A_n}{x - a_n} - B \right] = 0; \quad \prod_{i=1}^N (x - a_i) = 0 \quad (2.14.18)$$

olduqda ödənilir. Birinci şərt həyəcanlanmış, ikinci isə həyəcanlanmamış məsələnin tənliyinin köklərini müəyyən edir; Ona görə də o, bizi maraqlandırmır və bundan sonra $\prod_{i=1}^N (x - a_i) \neq 0$ hesab edəcəyik. $f(x, B)$ -ni başqa şəkildə təsəvvür edək:

$$\begin{aligned} f(x, B) &= -B \prod_{i=1}^N (x - a_i) + \sum_n \prod_{i \neq n} (x - a_i) A_n = \\ &= -Bx^N + \left[\sum_n A_n + B \sum_n a_n \right] x^{N-1} + \dots + \left[\sum_n \frac{A_n}{a_n} \prod_{i=1}^N a_i + B \prod_{i=1}^N a_i \right] x(-1)^{N+1}. \end{aligned} \quad (2.14.19)$$

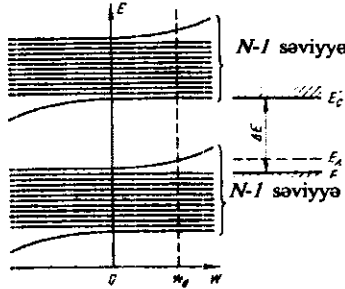
$f(x, B)$ funksiyası B -yə nəzərən xətti və $x \rightarrow \infty$ görə N tərtibli polinomdur, ona görə istənilən $B \neq 0$ üçün N sayda kökə malikdir.

$x \rightarrow \infty$ olduqda əsas rolu ən yüksək üstlü hədd $-Bx^N$ həddi oynayır. $f(x, B)$ -nin sonlu kəmiyyət olması üçün $B \rightarrow 0$ olmalıdır. Buradan başqa nəticə alınır: əgər $B \rightarrow 0$ olarsa, onda $x \rightarrow \infty$ (təxminən B^{-1} kimi). Beləliklə, $W_0 V_R \pm \infty$ şərtindən $E \rightarrow \pm \infty$ alınır. Buradan belə bir sual çıxır ki, (2.14.19) tənliyinin bütün kökləri sonsuzluğa yaxınlaşır, yoxsa yox? Fərz edək ki, $B = 0$, onda

$$f(x, 0) = \left(\sum_{n=1}^N A_n \right) x^{N-1} + \dots + (-1)^{N+1} \prod_{i=1}^N a_i \sum_n \frac{A_n}{a_n} \quad (2.14.20)$$

yəni $B = 0$ -da $f(x, 0)$ $x \rightarrow \infty$ görə $N - 1$ dərəcəli polinomdur və $N - 1$ sayda həyəcanlanmamış tənliyin kökləri ilə üst-üstə düşən kökü vardır. Buradan aşağıdakı nəticəyə gəlirik. **Kristalda kafi qədər lokal həyəcanlanma əlavə olunduqda həyəcanlanmamış sistemin alt enerji səviyyələrindən biri səviyyələr toplusundan qopub ayrılır və ya aşağı düşür, ya da yuxarı qalxır.** $N - 1$ sayda qalan səviyyələr toplusu praktiki olaraq öz vəziyyətini dəyişmir. $W_0 V_R > 0$ olduqda enerjinin maksimal qiymətinə uyğun səviyyə yuxarı qalxır, $W_0 V_R < 0$ olduqda isə minimal enerjiyə uyğun səviyyə aşağı enir (şək 2.19). Bu səbəbdən qadağan zonasında icazəli enerji səviyyələri meydana çıxır. Qadağan zonasındakı səviyyənin dalğa funksiyasına baxaq. Bu halın enerjisi $E_i > E(\vec{k})$ olsun. Dalğa funksiyası aşağıdakı kimi yazıla bilər:

$$\begin{aligned}\psi_t(\bar{r}) &= \sum_{\bar{k}} c_{\bar{k}} \psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \sum_{\bar{k}} \frac{\psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}') W_0 V_R \psi_t(\bar{R}')}{E_t - E_0(\bar{k})} \psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \\ &= \sum_{\bar{k}} \psi_t(\bar{R}') W_0 V_R \sum_{\bar{k}} \frac{\psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}')}{E_t - E_0(\bar{k})} \psi_{\bar{k}}(\bar{r})\end{aligned}\quad (2.14.21)$$



Şəkil 2.19. Kristal lokal həyəcanlanma əlavə olunduqda zonadan enerji səviyyələrinin qopub ayrılması

$\psi_t(\bar{r})$ funksiyasının tərtibində $\frac{\psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}')}{E_t - E_0(\bar{k})}$ çəkili bütün $\psi_{\bar{k}}(\bar{r})$ funksiyaları iştirak edir.

$W_0 V_R \rightarrow \infty$ şərtində $\psi_t(\bar{r})$ funksiyasının limit şəklini tapmaq. Bu halda

$$\frac{E_t}{W_0 V_R} \sim 1, E_t \gg E_0(\bar{k}) \quad (2.14.22)$$

və

$$\psi_t(\bar{r}) \approx \psi_t(\bar{R}') \sum_{\bar{k}} \psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}') \psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \psi_t(\bar{R}') \sum_{\bar{k}} e^{-i(\bar{k}\bar{R}')} \psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}') \psi_{\bar{k}}(\bar{r}). \quad (2.14.23)$$

Əgər axırıncı ifadədə $\psi_{\bar{k}}^*(\bar{R}')$ -i \bar{k} -dan asılı olmayan hər hansı $\varphi^*(\bar{R}')$ maksimal kəmiyyəti ilə əvəz etsək, (2.14.23) cəminin qiymətini alarıq:

$$\psi_t(\bar{r}) \leq \psi_t(\bar{R}') \varphi^*(\bar{R}') \sum_{\bar{k}} e^{-i(\bar{k}\bar{R}')} \psi_{\bar{k}}(\bar{r}) \quad (2.14.24)$$

$$\sum_{\bar{k}} e^{-i(\bar{k}\bar{R}')} \psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = \sqrt{N} \Phi(\bar{r} - \bar{R}') \quad (2.14.25)$$

işarələməsini daxil edək. $\Phi(\bar{r} - \bar{R}')$ **Vanye funksiyası** adlanır. O, \bar{R}' nöqtəsinin yaxın ətrafında sıfırdan fərqlidir. Həqiqətən, $\Phi(\bar{r} - \bar{R}')$ funksiyasını

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r} - \vec{R}') &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \vec{R}')} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \vec{R}')} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{R}') = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r})} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}') = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}')\end{aligned}\quad (2.14.26)$$

kimi göstərmək olar. Amma çox böyük sayda periodik funksiyaların (müstəvi dalğaların) cəmi $\vec{r}'=0$ və onun yaxın ətrafındakı nöqtələrdən başqa hər yerdə sıfıra yaxın kəmiyyət verir. Ona görə Vanye funksiyası \vec{R}' nöqtəsinin yaxın ətrafında sıfırdan fərqlidir.

Buradan görünür ki, $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyası $\Phi(\vec{r} - \vec{R}')$ Vanye funksiyası ilə mütənasibdir, deməli, $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ \vec{R}' yaxınlığında kiçik oblastda sıfırdan fərqlidir. Faktiki olaraq $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa paketinin \vec{k} dalğa vektorundan $\varphi_{\vec{k}}(\vec{R}')$ asılılığı üzündən Vanye funksiyasına nisbətən daha böyük oblastı əhatə edir, amma dalğa funksiyasının xarakteri olduğu kimi qalır. Bu nəticə çox əhəmiyyətlidir – qadağan zonasında $E_{\vec{k}}$ enerjiyə malik elektron V_R ilə eyni tərtibli hər hansı həcmdə lokallaşmış olur. Başqa sözlə, elektron həyəcanlanma oblastında lokallaşır.

$W_0 V_R$ sonlu kəmiyyəti üçün elektronun lokallaşma oblastı genişləninir: **həyəcanlanma enerjisi nə qədər kiçik olursa, lokallaşma oblastının ölçüləri bir o qədər böyük olur.** Bu qənaət $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ -in birbaşa ifadəsindən görünür: $E_{\vec{k}}$ enerjisi $E_0(\vec{k})$ -ya yaxın olduqca, uyğun $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ dalğa funksiyalarının çəkisi də böyük olur. $W_0 V_R \rightarrow 0$ olduqda lokallaşmış halın $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ funksiyası elektronun tamamilə dekloralizə olunmuş halını təsvir edən $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ funksiyalarından birinə keçir.

Alınan bu nəticə yarımkeçiricilər fizikası üçün çox böyük əhəmiyyətə malikdir.

Beləliklə, aşağıdakı mühüm qənaətlərə gəlik:

1. Kristal qəfəsin periodik sahəsinin aşqar atomları, vakansiyalar, nöqtəvi defektlər, dislokasiyalar şəklində lokal pozuntuları həyəcanlanma oblastı ilə əlaqədar qadağan zonasında icazəli zonaların meydana çıxmasına səbəb olur.

2. Elektronun dalğa funksiyası kristalın məhz həyəcanlanmanın mövcud olduğu oblastda sıfırdan fərqlidir, başqa sözlə, elektron həyəcanlanma oblastında lokallaşmış olur.

3. Elektronun lokallaşmış halına uyğun enerji səviyyələri enerji zonalarının ekstremal səviyyələrinin qopub ayrılması və onun qadağan zonasına keçməsi nəticəsində yaranır. Əgər həyəcanlanma mənfidirsə, onda minimal enerji səviyyəsinin, müsbətdirsə maksimal enerji səviyyəsinin

enerji zonasından qopub ayrılması hesabına qadağan zonasında icazəli enerji zonaları yaranır. Müsbət həyəcanlanmaya misal Vakansiya oblastında mövcud olan həyəcanlanmadır. Həyəcanlanma güclü olduqca, lokal səviyyə də uyğun zonadan daha uzaqda yerləşir (şək 2.19).

4. Lokal həyəcanlanmaların N_c konsentrasiyası artdıqca, onlar arasındakı orta məsafə $N_c^{-1/3}$ -lə təyin olunduğundan, azalır. N_c konsentrasiyasının artımı ilə lokallaşmış halların dalğa funksiyaları bir-birini örtə bilər, bu lokallaşmış hallar arasında mübadilə qarşılıqlı təsirinin meydana çıxmasına, o da öz növbəsində E_c diskret lokal enerji səviyyələrinin parçalanaraq enerji zonaları əmələ gətirməsinə səbəb olur.

Əgər lokal həyəcanlanma aşqar atomları tərəfindən baş veribsə, onda uyğun səviyyələr və zona aşqar səviyyələri və aşqar zonası adlanır. Aşqar səviyyələrin aşqar zonalara çevrilmələri üçün aşqar atomlarının konsentrasiyası kafi qədər böyük olmalıdır.

§ 2.15. Lokal və aşqar səviyyələrin elementar nəzəriyyəsi

İdeal kristallardan fərqli olaraq real kristallarda periodik potensialın istənilən lokal dəyişmələri lokal həyəcanlanmaların, o da öz növbəsində qadağan zonasında bu həyəcanlanma oblastı ilə əlaqəli icazəli enerji səviyyələrinin meydana çıxmasına səbəb olur. Lokal həyəcanlanmalar real kristallarda müxtəlif defektlərin mövcudluğu ilə əlaqədardır. Bunlara: a) kənar aşqar atomları (düyün nöqtələrində əsas atomları əvəz edən əvəzedici aşqarlar və yaxud düyünlər arası fəzaya daxil edilmiş aşqar atomları); b) kristalda düyün nöqtələri arasındakı fəzaya daxil olan əsas atomlar; c) kristalda təsadüfi boş qalmış düyün nöqtələri (vakansiyalar); d) dislokasiyalar; e) kristalın səthi və s. aiddir. Praktiki cəhətcə ən mühüm hal yarımkəçiriciyə aşqar atomlarının daxil edilməsidir. Qadağan zonasında aşqar səviyyənin vəziyyətini qiymətləndirək. Elektronun aşqar səviyyəsindən enerji zonasına keçidi aşqar atomunun ionlaşması ilə eynigüclüdür, ona görə də enerji diaqramında koordinat başlanğıcı olaraq enerji zonasının dibini götürmək əlverişlidir. Zonanın dibi ilə aşqar səviyyəsinin enerji fərqi aşqar atomunun ionlaşma enerjisinə bərabər olmalıdır. Qələvi metallar üçün sərbəst atomun ionlaşma enerjisi 4-5 eV-a yaxın kəmiyyətdir. Atomu aşqar kimi yarımkəçirici maddəyə daxil etdikdə, o, əsas maddə atomları ilə qarşılıqlı əlaqəyə girir, ona görə aşqar atomunun elektronunun əlaqə enerjisi sərbəst atomdakına nəzərən kiçilir. Misal olaraq dördvalentli germanium kristalında atomların bir hissəsinin beşvalentli fosfor atomla-

rı ilə əvəz olunması halına baxaq. Fosfor atomunun beş valent elektronundan dördü germaniumun dörd valent elektronu kimi, kristalda tetraedrik kovalent rabitəni tamamlayacaq, beşinci elektron elektron cütü əlaqələrində iştirakdan kənar qalır və qəfəs daxilində digər germanium atomlarının təsiri altında olduğundan öz atomu ilə əlaqəsi nisbətən zəifləyir, bu elektron Bor nəzəriyyəsi baxımından yanaşsaq, onlarla, yüzrlərlə atomu əhatə edən daha böyük radiuslu orbit boyunca hərəkət etməyə başlayır. Ona görə də belə elektronun hərəkətinə dielektrik nüfuzluğuna malik mühitdəki hərəkət kimi baxaraq, onun potensial enerjisini Qauss sisteminə

$$V(r) = -\frac{ze^2}{\epsilon r} \quad (2.15.1)$$

kimi ifadə edə bilərik, bu hal ümumiyyətlə desək, yalnız makroskopik nöqtəvi defektlər üçün doğrudur. İonun yükünü $+ze$ götürmüşük. Onda elektronun H tam enerjisi

$$H = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{ze^2}{\epsilon r} = T + V \quad (2.15.2)$$

olar. Nöqtəvi yükün Kulon sahəsində elektronun hərəkəti məsələsinin kvantomexaniki həlli enerji üçün Bor nəzəriyyəsinin verdiyi qiyməti verdiyindən, aşqar atomuna baxılan halda hidrogenəbənzər atom kimi yanaşaraq enerjini qiymətləndirə bilərik.

Dairəvi orbitdə hərəkətin dayanaqlılığı şərtindən

$$\frac{m^* v^2}{r} = \frac{ze^2}{\epsilon r^2} \quad (2.15.3)$$

kinetik və potensial enerji arasındakı əlaqəni tapa bilərik:

$$T = \frac{m^* v^2}{2} = \frac{ze^2}{2\epsilon r} = -\frac{V}{2}, \quad (2.15.4)$$

onda

$$H = \frac{1}{2}V = -T = -\frac{1}{2} \frac{ze^2}{\epsilon r} = -\frac{p^2}{2m^*} = E \quad (2.15.5)$$

alırıq. Buna görə M -hərəkət miqdarı momentinin kvantlanma şərti

$$M = rp = m^* v r = n\hbar \quad (2.15.6)$$

və (2.15.3)-dən

$$\frac{r^2 m^* v^2}{m^* r} = \frac{M^2}{m^* r} = \frac{n^2 \hbar^2}{m^* r} = \frac{ze^2}{\epsilon} \quad (2.15.7)$$

$$\frac{1}{r} = \frac{m^* ze^2}{\epsilon \hbar^2 n^2} = \frac{1}{r_n}$$

alırıq. Buradan görünür ki, **hidrogenəbənzer atom sistemlərində bor orbitlərinin radiusları sərbəst «hidrogen» atomundakına nəzərən ε dəfə artır.** Enerjinin mümkün qiymətləri

$$E = E_n = -\frac{1}{2} \frac{z^2 e^4 m^*}{\hbar^2 n^2 \varepsilon^2} \quad (2.15.8)$$

kimidir. İonlaşma enerjisi E_1 ədədi qiymətcə əsas halın ($n=1$) enerjisinə bərabərdir:

$$E_i = E_1 = -\frac{1}{2} \frac{z^2 e^4 m^*}{\hbar^2 \varepsilon^2}. \quad (2.15.9)$$

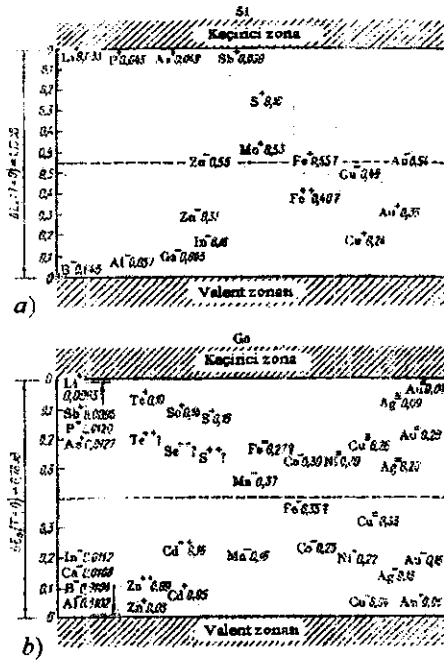
e, \hbar və m -in qiymətlərini nəzərə alaraq

$$E_i = \frac{1352 \cdot z^2}{\varepsilon^2} \left(\frac{m^*}{m} \right) (eV) \quad (2.15.10)$$

alırıq. Burada 13,52 eV hidrogen atomunun ionlaşma enerjisidir. Aldığımız ifadədən görünür ki, $E_i \sim z^2$, yəni **birqat və ikiqatyükü aşqar ionunun enerji səviyyələri enerji zonasının dibindən müxtəlif məsafədədirlər.** Bu da təbiidir, çünki, yükü $2e$ olan ionun yaratdığı həyəcanlanma yükü e olan ionun yaratdığından çox olmalıdır və bu əvvəlki paraqrafdaki ümumi nəzəriyyədən alınan nəticə ilə tam uyğundur.

Daha sonra, bu ifadəyə görə $E_i \sim \frac{1}{\varepsilon^2}$, yəni **aşqar atomunun ion-**

laşma enerjisi hidrogen atomunun ionlaşma enerjisinə nəzərən ε^2 dəfə kiçilir. Germanium üçün $\varepsilon=16$, silisium üçün isə $\varepsilon=12$, ona görə də onlarda aşqar atomlarının ionlaşma enerjiləri, və hidrogen atomunun ionlaşma enerjisindən 256 və 144 dəfə kiçikdir və elektron voltlarla m^*/m -in uyğun olaraq 0,05 və 0,1 hissələrini təşkil edirlər. m^*/m - vahiddən bir qədər kiçik olduğundan, deyə bilərik ki, germaniumda aşqarın ionlaşma enerjisi 0,05 eV-dan, silisiumda isə 0,10 eV-dan kiçik kəmiyyətdir. Şək 2.20-də silisium və germaniumda müxtəlif aşqarların əsas səviyyələri göstərilmişdir. (2.15.10) ifadəsində hidrogen atomunun ionlaşma enerjisinin yerinə aşqar kimi daxil edilən sərbəst atomun ionlaşma enerjisini qoysaq aşqar atomlarının ionlaşma enerjiləri arasındakı fərqi keyfiyyətcə nəzərə almaq olar. **Sərbəst elektron əmələ gəlməsinə səbəb olan aşqar donor adlanır.** Beləliklə, **donor səviyyəsi enerji zonasının dibi üzərində yaranır.**



Şəkil 2.20. Silisiumda (a) və germaniumda (b) aşqarların enerji səviyyələri sxemi

$A^{III}B^V$ tipli birləşmələrdə donorların ionlaşma enerjilərini nəzərdən keçirək. Şəkildən görüldüyü kimi onların dielektrik nüfuzluğu germanium və silisiumun dielektrik nüfuzluğu ilə eyni tərtibdədir, ona görə də ilk baxışdan elə görünür ki, onlar üçün aşqarların ionlaşma enerjiləri də eyni tərtibli olmalıdır. Amma təcrübə göstərir ki, bir çox hallarda bu kəmiyyət xeyli kiçikdir. Bunun səbəbi germanium və silisium

Cədvəl 1

Müxtəlif maddələrin dielektrik nüfuzluğu

Maddə	ϵ	Maddə	ϵ	Maddə	ϵ
Almaz	5,7	ZnS	7,9	InAs	11,7
Kvars	4,3	CdTe	11,0	GaP	10,1
Kükürd	3,7	InSb	15,9	GaAs	12,5
Silisium	11,7	InP	10,8	GaSb	12,5
Germanium	15,8				

üçün m^*/m nisbətinin vahidə yaxın olmasıdır, $A^{III}B^V$ tipli birləşmələrdə isə bu kəmiyyət vahiddən çox-çox kiçikdir ki, bunun da nəticəsində ionlaşma enerjisi E_i yüzdə bir və hətta mində bir elektron-volta qədər kiçik ola bilər. Cədvəl 1-də $A^{III}B^V$ tipli birləşmələrdə aşqarların E_i -ionlaşma enerjiləri və birinci bor orbitlərinin radiusları anqstremlərlə göstərilmişdir. Zona ilə donör səviyyələri arasındakı dar enerji məsələrinin mövcudluğu $A^{III}B^V$ tipli bir çox birləşmələrin xarakterik xüsusiyyətlərindəndir. Adi şəraitdə bu məsələ onların bir çoxunda eksperimentdə özünü biruzə vermir. Məsələn *InSb* birləşməsində $T=2K$ temperaturda və konsentrasiyanın $n=10^{13} \text{ sm}^{-3}$ qiymətində enerji zonası ilə aşqar zonası arasındakı məsələ aşkar olunmamışdır.

Cədvəl 2

$A^{III}B^V$ birləşmələrində birinci bor orbitinin a_1 radiusları və aşqar atomlarının E_i -in «orta» ionlaşma enerjiləri

Maddə	Akseptorlar		Donorlar	
	E_i, eV	$a_1, \text{Å}$	E_i, eV	$a_1, \text{Å}$
<i>InSb</i>	0,03	14	0,0007	640
<i>InAs</i>	0,05	12	0,002	310
<i>InP</i>	-	-	0,008	80
<i>GaSb</i>	0,03	15	0,003	150
<i>GaAs</i>	0,05	12	0,008	85

İndi isə akseptor aşqara baxaq. Fərz edək ki, germanium kristalına indium atomları daxil edilmişdir. Üç indium elektronu kovalent rabitədə iştirak edir, dördüncü rabitə cütü isə tamamlanmamış qalır. Qonşu germanium atomlarındakı kovalent rabitədə iştirak edən elektronlardan biri bu rabitə cütünü tamamlaya bilər və onda elektronun belə keçidi indium atomunu mənfi yüklü indium ionuna çevirir. Əsas maddə atomlarındakı tamamlanmamış rabitə yeri kənarından heç bir təsir olmadan kristal boyu öz yerini dəyişə bilər. Eyni zamanda indium ionundan elektronun getməsi onu neytral indium atomuna çevirir. Kristal qəfəsin periodikliyinə pozulması baxımından aşqar atomunun daxil edilməsinin nə demək olduğunu xətti model əsasında araşdırmaq. Şək 2.14-də əsas maddənin atom zəncirinin potensial əyrisi verilmişdir. Fərz edək ki, bir atomu kənarlaşdırmışıq. Onda bu atomun yerində mövcud olan potensial çuxur yox olmalıdır. Bu isə uzaqlaşdırılan atom tərəfindən kristalın periodik sahəsinə əlavə olunan müsbət həyəcanlanma ilə eyni güclüdür. Buradan aydın olur ki, boş va-

kant düyün özünü zonanın tavanında lokal hal doğuran, bir neçə qonşu atomla tutulmuş oblasta yayılan kifayət qədər böyük müsbət lokal həyəcanlanma kimi aparır. Başqa sözlə, **vakant düyünlər deşikləri törədirlər.** Vakant yerin neytral indium atomu ilə tutulması vakansiyanın zəif dəyişən sahəsini yalnız indium atomunun öz daxilində dəyişir, **atomun xaricində isə qəfəsin sahəsi təhrif olunmuş şəkildə qahr və təhrifin xarakteri müsbət həyəcanlanmaya uyğundur.** Zonanın tavanı ilə neytral atomu mənfi yüklü iona çevirmək üçün tələb olunan enerji kimi interpretasiya oluna bilən lokal səviyyə arasındakı məsafə

$$E_i = \frac{13,52}{\epsilon^2} \left(\frac{m^*}{m} \right) \quad (2.15.11)$$

kimi yazıla bilər. Burada m^* elektronun zonasının tavanında effektiv kütləsinin moduludur. Cədvəl 2-də akseptor aşqarlarının ionlaşma enerjiləri göstərilmişdir. Aşqar atomlarına hidrogenə bənzər kimi baxaraq onlar tərəfindən yaradılan həyəcanlanmaların modelləşməsi kifayət olmayıb, yalnız diskret səviyyələrin yaranmasına gətirib çıxaran aşqar atomlarının ionlaşma enerjisinin tərtibini müəyyən etməyə imkan verir.

Baxılan haldan aydındır ki, nöqtəvi defekt və dislokasiyalar **yükdaşıyıcıların, əksər halda isə deşiklərin törədiciləri ola bilərlər.**

(2.15.10) və ya (2.15.11) münasibətləri ilə təyin olunan «dayaz» səviyyələrlə yanaşı yarımkeçiricilərdə enerji zonalarından böyük məsafələrdə yerləşən lokal səviyyələr də vardır. Belə «dərini» səviyyələr hidrogenə bənzər model baxımından izah oluna bilmir. Dərin enerji səviyyələrinin mövcudluğunu izah etmək üçün belə aşqar atomlarında elektronların əsas maddə atomları ilə zəif qarşılıqlı təsirdə olduğu, aşqar atomu elektronunun orbitinin kiçik radiusa malik olduğu hesab edilir. Elektronun belə halını təsvir etmək üçün

$$V(r) = -\frac{Ae^{-\alpha r}}{r} \quad (2.15.12)$$

kimi ekranlayıcı potensial seçək. Belə seçilmiş potensial kiçik məsafələrdə böyük qiymətlərə çatır, amma artıq $(2-3)\alpha^{-1}$ tərtibli məsafələrdə həyəcanlanma sıfıra çevrilir. α böyük olduqca, aşqarın modelləşdirdiyi potensial çuxur daha dar olur. Kvant mexanikasından məlum olduğu kimi potensial çuxurun eni nə qədər kiçik olsa, enerji səviyyələri arasındakı məsafə bir o qədər böyük olub, belə potensial çuxurda elektronların enerji səviyyələri daha dərinə yerləşir. (2.15.12) həyəcanlanması üçün elektronun enerji səviyyələrini qiymətləndirək. Bunun üçün orta həyəcanlanma enerjisini müəyyənləşdirək:

$$\int_{V_R} W(r) dr = - \int_0^R \frac{A4\pi e^{-\alpha r}}{r} r^2 dr \approx - \frac{4\pi A}{\alpha^2}. \quad (2.15.13)$$

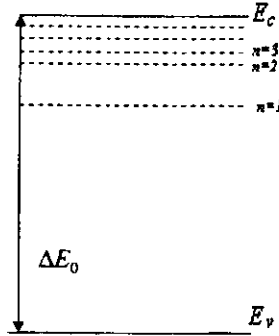
Əgər potensial çuxurun radiusunu c/α qəbul etsək, burada $c=2-3$ tərtibli kəmiyyətdir, onda

$$V_R = \frac{4\pi c^3}{3\alpha^3}, \quad (2.15.14)$$

və orta həyəcanlanma W_0 üçün isə

$$W_0 = - \frac{3A}{c^3} \alpha \quad (2.15.15)$$

alarıq. Beləliklə, α artdıqca, potensial çuxurun diametri kiçilir, orta həyəcanlanma və lokal enerji səviyyəsinin sürüşməsi isə böyüyür. Qeyd edək ki, kulon potensialı üçün $\alpha = 0$.



Şəkil 2.21 Qadağan zonasında aşqarın hidrogenəbənzər enerji səviyyələri sistemi

Qeyri-tarazlıq proseslərinin axırında dərin səviyyələr mühüm rol oynayırlar. (2.15.8) ifadəsini (2.15.10)-u nəzərə almaqla

$$E_n = - \frac{E_I}{n^2} \quad (n=1,2,3,\dots) \quad (2.15.16)$$

kimi yazaq (enerji uyğun zonanın ekstremumundan hesablanır). Bu o deməkdir ki, aşqar atomunun daxil edilməsi qadağan zonasında uyğun enerji zonasına yığılan hidrogenəbənzər enerji səviyyələrinin şəkl 2.21 -də göstərilən tam seriyasına gətirir. Belə enerji səviyyələrinin məcmusu yarımkeçiricilərin optik xassələrində (aşqar atomları tərəfindən işığın udulması) özünü biruzə verir.

§ 2.16. Səth halları. Tamm səviyyələri

Real kristallarda sonlu ölçülər və sərhədlərin mövcudluğu ilə əlaqədar qəfəs periodikliyinə pozulması qaçılmazdır. İndiyə kimi biz kristalda periodikliyin davam etməsi şərti ilə sərhədlərin mövcudluğunu istisna etmişik. Potensial sahənin birölçülü modelində sərhədlərin mövcudluğunun enerji spektrində hansı dəyişikliklərə gətirib çıxarmasına baxaq. Koordinat başlanğıcını birölçülü yarımsonlu kristalın sol sərhəddində yerləşdirək. Birinci oblastda ($x < 0$) $U(x) = U_0$, ikinci oblastda isə ($x > 0$) $U(x + a) = U(x)$ olur.

1-ci və 2-ci oblastlarda Şredinger tənliyi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + U_0 \psi_1(x) = E \psi_1(x) \quad (1\text{-ci oblast}) \quad (2.16.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} + U(x) \psi_2(x) = E \psi_2(x) \quad (2\text{-ci oblast}) \quad (2.16.2)$$

şəklindədir. $E < U_0$ olduqda elektronun halını tapaq. 1-ci oblast üçün Şredinger tənliyinin həllini yazaq:

$$\psi_1(x) = Ae^{\chi x} + Be^{-\chi x}; \quad \chi = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (2.16.3)$$

$\chi \rightarrow -\infty$ olduqda ikinci hədd sonsuz böyüyür, ona görə də $B = 0$ qəbul edilməlidir. x -in böyük müsbət qiymətlərində sərhədlərin elektronun hərəkətinə təsiri kiçik olur, ona görə (2.16.2) tənliyinin həlli Blox funksiyaları şəklində olmalıdır:

$$\psi_2(x) = e^{i k x} \varphi_{2,k}(x). \quad (2.16.4)$$

Qeyri-məhdud kristal üçün Blox funksiyasına daxil olan dalğa vektoru həqiqidir, əks halda Blox funksiyası sonsuzluqda qeyri-məhdud olar. Amma baxılan halda $x < 0$ qiymətləri reallaşmadığından k -nin həqiqilik şərti pozula bilər. Bundan əlavə k -nin həqiqi qiymətlərində dalğa funksiyasının və onun birinci tərtib törəməsinin $x = 0$ nöqtəsində kəsilməzliyi şərti ödənilə bilməz. Ona görə tutaq ki, dalğa vektorunun komplekslikliyi $\psi_2(x)$ dalğa funksiyasına qoyulan lazımi tələbləri ödəyir. Bu halda

$$k = k_1 + i k_2 \quad (2.16.5)$$

qəbul edib ikinci oblast üçün ümumi həlli yazaq:

$$\psi_2(x) = C e^{i(k_1 + i k_2)x} \varphi_k(x) + D e^{-i(k_1 + i k_2)x} \varphi_{-k}(x) \quad (2.16.6)$$

$D = 0$ qəbul edilməlidir, əks halda $x \rightarrow \infty$ -da $\psi_2 \rightarrow \infty$ alınır. A və C -nin tapılması üçün ψ və ψ' -in kəsilməzlik şərtini yazaq:

$$\psi_1(0) = A = \psi_2(0) = C \psi_k(0), \quad (2.16.7)$$

$$\psi_1'(0) = \chi A = \psi_1'(0) = C[ik\varphi_k(0) + \varphi_k'(0)]. \quad (2.16.8)$$

(2.16.8)-i (2.16.7)-yə böüb, naməlum A və C əmsallarını yox etsək, nəticədə alırıq:

$$\chi\varphi_k(0) = ik\varphi_k(0) + \varphi_k'(0) \quad (2.16.9)$$

və ya

$$\chi = ik + \frac{\varphi_k'(0)}{\varphi_k(0)} = ik + [\ln\varphi_k(0)]'. \quad (2.16.10)$$

Ümumi halda $\varphi_k(x)$ funksiyası kompleks funksiyadır, ona görə onun loqarifmi də kompleks kəmiyyət olur, amma bu zaman χ həqiqi ədəddir. Loqarifmin törəməsinin həqiqi və xəyali hissələrini ayıraraq:

$$[\ln\varphi_k(0)]' = \lambda + i\mu \quad (2.16.11)$$

və onu (2.16.10)-da nəzərə alaraq

$$\chi = ik + \lambda + i\mu = ik_1 - k_2 + \lambda + i\mu, \quad (2.16.12)$$

buradan

$$\chi = \lambda - k_2; \quad k_1 = -\mu \quad (2.16.13)$$

alınır. Enerjinin ifadəsini yazaq:

$$E(k) = U_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = U_0 - \frac{\hbar^2 (k_2 - \lambda)^2}{2m}. \quad (2.16.14)$$

$k_2 = 0$ olduqda $E(k) = E(k_1)$ müəyyən zona quruluşuna malik olur. Enerjinin ifadəsi $\chi = \lambda$ şərti ilə χ -nin mümkün qiymətlərini məhdudlaşdırır, burada $\lambda = \text{Re}[\ln\varphi_k(0)]'$, belə ki, $\varphi_k(x)|_{x=0}$ k -dən asılı hər hansı funksiyadır. Əgər $k_2 \neq 0$ olarsa, λ -nın fiksə olunmuş qiymətlərində enerji k_2 -nin kvadratik funksiyası olur ki, bu da λ -nın istənilən qiymətində doğrudur. Amma bu o deməkdir ki, $k_2 \neq 0$ qiymətlərində enerjinin elə qiymətləri meydana çıxır ki, bu qiymətlər qeyri-məhdud kristal üçün elektronun enerji spektrinə daxil olmur, belə ki, qeyri-məhdud kristalda enerjinin qiymətləri $k_2 = 0$ şərti ilə təsvir olunur. Kristalın məhdudluğu ilə əlaqədar meydana çıxan səviyyələr qadağan zonasında yerləşməlidir.

Bu səviyyələrə uyğun halları nəzərdən keçirək:

$$\psi_2(x) = Ce^{ik_1 x} \varphi_k(x) e^{-k_2 x} \quad (x > 0) \quad (2.16.15)$$

$$\psi_1(x) = Ae^{ix} \quad (x < 0) \quad (2.16.16)$$

Buradan görünür ki, sərhədlərlə əlaqədar meydana çıxan halların dalğa funksiyaları sərhəddən hər iki tərəfə doğru eksponensial enirlər, yəni bu hallar qalınlığı k_2^{-1} tərtibdə olan sərhəd təbəqəsində lokallaşırlar, bununla əlaqədar onlar sərhəd halları, əlavə səviyyələr

isə - səth səviyyələri və ya Tamm səviyyələri adlanırlar (bunların mövcudluğu ilk dəfə Tamm tərəfindən 1932-ci ildə əvvəlcədən söylənilmişdir). Tamm səviyyələrinin konkret vəziyyətləri üçün ifadələr $[U_k \varphi_k(0)]$ vasitəsilə $U(x)$ potensialının şəklindən və sahəyə nəzərən kəsilmə yerinə görə sərhədlərin vəziyyətindən asılıdır.

Üçölçülü kristal üçün səth hallarının sayı $10^{15} - 10^{16} \text{ sm}^{-3}$ kəmiyyətinə qədər çatır.

Tamm səviyyələri ilə yanaşı səth təbəqəsində qəfəs sahəsinin çoxsaylı pozuntuları (defektlərlə və adsorbsiya etmiş atomlarla əlaqədar) ilə əlaqədar böyük sayda lokallaşmış hallar vardır. Əgər verilmiş kristal üçün Tamm səviyyələri ilə əlaqədar halların sayı sabitdirsə, onda kristalın defektləri və adsorbsiya etmiş atomlarla yaranan halların sayı səthin emalından (cılalama, aşılama, ləkləmə və s.) və ətraf şəraitdən (temperatur, nəmlik, qaz atmosferi və s.) asılı olaraq dəyişə bilər. Elektronun kristalın səthində və həcmindəki halları arasında bir sıra qarşılıqlı təsirlər mümkündür ki, onlar ehtimal vəziyyətə gətirirlər ki, səthdəki hallar kristalın həcmində cərəyan edən fiziki proseslərə çox güclü təsir göstərirlər. Yarımkəçirici cihazların iş prosesində səth halları özlərini daha güclü şəkildə biruzə verə bilərlər və bunlar müvafiq şəkildə nəzərə alınmalıdır.

§2.17. Pauli prinsipi. Metal, yarımkəçirici və dielektrik anlayışları

Klassik zərrəciyin halı altı fiziki kəmiyyətin, məsələn $(x_1, y, z, p_x, p_y, p_z)$ toplusu ilə xarakterizə oluna bilər. Spini nəzərə almasaq, kvant zərrəciyin halı üç kəmiyyətlə, məsələn $(x, y, z), (p_x, p_y, p_z)$ və ya (E, M^2, M_z) təsvir olunur. Daha dəqiq təsvir üçün istənilən topluya dördüncü kəmiyyət – spinin hər hansı istiqamət üzrə, adətən z oxu üzrə S_z toplananı daxil olmalıdır. Beləliklə, kvant halını təsvir etmək üçün lazım olan tam toplu dörd fiziki kəmiyyətdən (L_1, L_2, L_3, S_z) ibarət olmalıdır. Üç fiziki kəmiyyətin (L_1, L_2, L_3) seçimi kvant sisteminin şəklindən asılıdır. Atomda ən çox enerji E , orbital momentin modulu $|\vec{M}|$ və orbital momentin proyeksiyası M_z -dən ibarət topludan istifadə olunur. Adətən bu kəmiyyətlər uyğun kvant ədədləri n, ℓ və m ilə ifadə olunurlar. Kristalda

elektronun halını təsvir etmək üçün kvaziimpulsun proyeksiyaları (p_x, p_y, p_z) və ya dalğa vektorunun (k_x, k_y, k_z) proyeksiyaları və spinin S_z proyeksiyasından ibarət topludan istifadə etmək daha əlverişli və rahatdır.

Pauli prinsipini yada salaq: tam topluya daxil olan (L_1, L_2, L_3, S_z) fiziki kəmiyyətlərinin ölçülməsi zamanı hər bir tam toplu yalnız bir dəfə alınə bilər. Daha sadə şəkildə Pauli prinsipini belə ifadə etmək olar: (L_1, L_2, L_3, S_z) tam topluya malik istənilən halda birdən çox elektron ola bilməz. Bu prinsipin kristala tətbiqi o deməkdir ki, istənilən (k_x, k_y, k_z, s_z) halında yalnız bir elektron ola bilər. Əgər nəzərə alsaq ki, S_z yalnız $+1/2$ və $-1/2$ kimi iki qiymət ala bilər, onda deyə bilərik ki, istənilən (k_x, k_y, k_z) halında ikidən çox elektron ola bilməz. (k_x, k_y, k_z) toplusu enerjinin $E(\vec{k})$ qiymətini müəyyən edir, ona görə Pauli prinsipinə əsasən verilmiş enerji səviyyəsində məhdud sayda elektron ola bilər.

Zonada mümkün halların sayını tapaq. Əgər kristal tillərinin uzunluğu $N_1 a_1, N_2 a_2, N_3 a_3$ (N i -ci til boyu atomların sayıdır) olan paralelepiped şəklindədirsə onda kristaldakı atomların ümumi sayı $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = N$ olar; \vec{k} -vektorunun i -ci proyeksiyası isə aşağıdakı qiymətləri alır:

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{a_i N_i}; \quad n_i = 0; \pm 1; \pm 2; \dots \pm \frac{N_i - 1}{2}; \pm \frac{N_i}{2}; \quad (2.17.1)$$

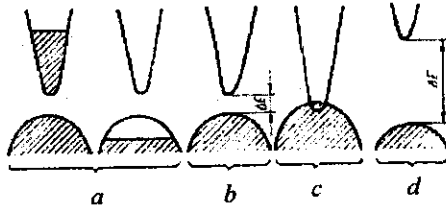
k_i -nin müxtəlif qiymətləri sayı N_i -yə bərabərdir. Brillyüen zonasında müxtəlif halların ümumi sayı $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3 = N$, yəni kristaldakı atomların sayına bərabərdir. Bu o deməkdir ki, sadə (cırışmamış) enerji zonasında və ona uyğun Brillyüen zonasında $2N$ sayda hal vardır və bu hallarda $2N$ -dən çox sayda elektron ola bilməz. Əgər zona g -qat cırışmış olarsa, belə zonada $2Ng$ sayda elektron ola bilər. Bu nəticə göstərir ki, atomlardan kristal əmələ gələrkən halların ümumi sayı saxlanılır. Həqiqətən, fərz edək ki, zona g -qat cırışmış səviyyələrdən yaranmışdır. Sərbəst atomda belə zonada $2g$ sayda elektron ola bilər. Əgər kristal N sayda sərbəst atomdan əmələ gəlibsə, onda $2Ng$ sayda hal vardır. Beləliklə, kristaldakı halların son sayı, atomdakı halların ilkin sayına bərabər olur.

Əgər hər hansı zonada heç bir elektron yoxdursa, onda xarici elektron sahəsi tətbiq olunduqda bu zonanın elektrik keçiriciliyində heç bir rolə ola bilməz. Eyni qaydada bütün səviyyələri elektronlarla tutulmuş zona da keçiricilikdə heç bir rol oynamır. Həqiqətən də elektron xarici sahənin təsiri ilə qonşu enerji səviyyələrinə keçir və bu da yalnız o zaman mümkün olur ki, qonşu enerji səviyyələri boş olsun.

Amma, əgər qonşu səviyyələr elektronlarla tam tutulmuşdursa, onda Pauli prinsipinə görə belə səviyyələrə elektronların keçidi mümkün deyil, və deməli, elektrik sahəsi belə elektronlar toplusunun istiqamətlənmiş hərəkətini doğura bilməz. Elektronlar yalnız tam dolmamış zonalarda olan zaman elektrik keçiriciliyində iştirak edə bilərlər. Bu sadə nəticə elektrik keçirmə qabiliyyətinə görə maddələrin təsnifatının əsasında durur.

İstənilən temperaturda tam dolmamış zonalara malik maddələr keçiricilərə aid edilir. Qeyri-keçiricilərə isə elə maddələr aid edilir ki, onların hər hansı sayda tam dolmuş zonaları sərbəst zonadan çadağan zonası ilə ayrılmışdır. Qeyri-keçiricilər yarımkeçirici və dielektriklər ola bilər. Maddələrin yarımkeçiricilərə və dielektriklərə bölünməsi şərtdir. Qadağan zonasının eni 2-3 eV-dan çox olmayan maddələr yarımkeçiricilərə, bundan böyük olanlar isə dielektriklərə aid edilir. Elektronlarla tam dolmuş ən yüksəkdə sərbəst zona valent, ən aşağıda yerləşən sərbəst zona isə keçirici zona adlanır. Şəkil 2.22-də metal (a), yarımkeçirici (b) və dielektrik üçün (d) zonaların energetik sxemi verilmişdir.

Zonalar modeli əsasında maddələrin siniflərə bölünməsinə bir sıra konkret maddə üçün araşdıraraq.



Şəkil 2.22

Metalların (a), yarımkeçiriciləri (b), yarımmetalların (c) və dielektriklərin (d) enerji zonalarının energetik sxemi

Qələvi metallar. Qələvi metal elementlərinin atomlarında n -ci s səviyyəsində yerləşən bir dənə valent elektronu var. Məsələn, Na -da elektron təbəqələrinin quruluşu belədir: $\{(1s^2)\}\{(2s^2)(2p^6)\}(3s^1)$. Aydın ki, $1s, 2s, 2p$ elektron təbəqələri tam doludur, ancaq $3s$ səviyyəsində mümkün olan iki yerdən yalnız biri tutulmuşdur. Kristal əmələ gələrkən daxili $1s, 2s, 2p$ təbəqələrinə uyğun gələn zonalarda elektronlarla tam dolmuş

olur, $3s$ təbəçəsinə uyğun gələn zona isə yalnız yarısına qədər dolmuş olur. Odur ki, bütün qələvi metallar, o cümlədən də Na , yaxşı keçiriciliyə malik olan kristallar əmələ gətirir, yeni metaldırlar.

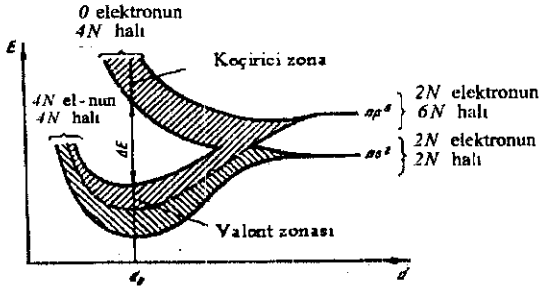
Qələvi torpaq metallar. Qələvi torpaq metalların hər bir atomunun n -ci s səviyyəsində iki valent elektronu vardır. Məsələn, maqneziumun (Mg) 12 elektronu təbəqələr üzrə belə paylanmışdır: $\{(1s^2)\}\{(2s^2)(2p^6)\}(3s^2)$. Buradan görünür ki, bütün elektron təbəqələri tam doludur, yəni Mg izolyator olmalıdır. Lakin məlumdur ki, ikinci qrup elementləri yaxşı keçiricidir (metaldırlar). Bunu $3p$ səviyyəsinə uyğun gələn boş zonanın axırıncı - ($3s$) dolu zona ilə qismən və ya tam üst-üstə düşməsi ilə izah etmək olar (şəkil 2.22). Belə olduqda dolu zonanın elektronları elektrik sahəsinin təsirinə məruz qaldıqda boş zonadakı səviyyələrə keçir və beləliklə, elektrik keçiriciliyində iştirak edir. 2.22-ci şəkildən görün-düyü kimi, üst-üstə düşmə qismən olduqda keçiricilikdə dolu zonanın yuxarı sərhəddində (maksimumunda) yerləşən elektronlar iştirak edəcəkdir. Məlumdur ki, belə olduqda elektronların effektiv kütləsi mənfi olur və onları deşiklərlə əvəz etmək olar. Bu isə özünü onda göstərir ki, adları çəkilən maddələrdən bəziləri p -tip keçiriciliyə malik olur (metallarda əsasən keçiricilik n -tipdir).

Üçüncü qrup elementlər. Üçüncü qrup elementlərində üç valent elektronundan təkə biri n -ci p səviyyəsindədir. Məsələn, alüminiumda $Al: \{(1s^2)\}\{(2s^2)(2p^6)\}(3s^2)(3p^1)$. Göründüyü kimi, axırıncı p səviyyəsinin yalnız $\frac{1}{6}$ -i doludur ki, bu da üçüncü qrup elementlərinin metal (keçirici) olmasını asanlıqla izah edir.

Dördüncü qrup elementlər. Dördüncü qrup elementləri atomlarının dörd valent elektronundan ikisi n -ci s səviyyəsində və ikisi də n -ci p səviyyəsində yerləşir. Kristal əmələ gələrkən zonaların cırlaşma dərəcəsi sərbəst atomda enerji səviyyələrinin cırlaşma dərəcəsi ilə eyni olsa idi, onda bu maddələr metal keçiriciliyinə malik olmalı idilər, çünki axırıncı p səviyyəsinin üçdə bir hissəsi doludur. Lakin məlumdur ki, silisium və germanium klassik yarımkeçiricilərdir, $\alpha - Sn$ yarımkeçirici xassəsinə malikdir, karbonun modifikasiyası olan almaz isə dielektrik xassəsinə malikdir. Bu isə deyilən fikrin əksinədir. Karbon, silisium və germaniumun elektron təbəqələrinin quruluşu belədir:

$$\begin{aligned} C(6): & \{(1s^2)\}(2s^2)2p^2, \\ Si(14): & \{(1s^2)\}\{(2s^2)(2p^6)\}(3s^2)3p^2, \end{aligned} \quad (2.17.2)$$

$$Ge(32): \{(1s^2)\} \{(2s^2)(2p^6)\} \{(3s^2)(3p^6)(3d^{10})\} (4s^2)4p^2.$$



Şek. 2.23. Silisiumda enerji zonalarının yaranması

Yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, bu elementlər almaz tipli quruluş üzrə kristallaşırırlar və bərk halda tetraedrik kovalent rabitənin yaranmasında hər atomun dörd valent elektronu iştirak edir. 2.23-cü şəkildə karbon atomlarının müvafiq enerji səviyyələrindən almazın zona quruluşunun yaranması sxemi göstərilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi, atomlar arasındakı məsafə kiçildikcə əvvəlcə *s* və *p* zonaları birləşərək (kəşisərək) ümumi bir zona əmələ gətirir və bu zonadakı bütün səviyyələrin sayı $8N$ -dir (burada N -kristal qəfəsində olan bütün atomların sayıdır). Sonra ümumi zona hər birində $4N$ səviyyə olan iki zonaya parçalanır. Beləliklə, alt zona (valent zonası) $4N$ elektronla tam doludur, üst zonada olan $4N$ səviyyələrin hamısı boşdur (almazın qadağan olunmuş zonasının eni $5,37$ eV-a bərabərdir). Buna oxşar mənzərə silisium, germanium və α -*Sn* üçün də öz qüvvəsində qalır. Təkcə qadağan olunmuş zonanın eni başqa-başqa qiymətlərə malik olur.

Beləliklə, pis keçiriciliyə malik olan kristalın (dielektrik, yarımkeçirici) yaranması üçün zonaların konfigurasiyası elə olmalıdır ki, zonadakı elektronların sayı mövcud olan səviyyələrin sayına bərabər olsun. Bu şərt $A^x B^{8-x}$ tipli birləşmələrdə ($x=1,2,\dots,7$, məsələn, $A^3 B^5$; burada A -III qrup, B -V qrup elementidir) asanlıqla ödənilir. Əgər A və B elementlərinin yaratdığı zonalər kəşisirsə, onda onlardan birinin *s* və *p* zonalarında (yaxud birinin *s* və digərinin *p* zonasında) hər iki atoma 8 səviyyə düşür və bunları da iki atomun 8 elektronu tam doldurur.

§ 2.18. Bəzi yarımkəçiricilərin zona quruluşu

İndiyə qədər biz maddələrin zona quruluşunun hesablanması üçün ümumi metodlarına baxırdıq. Hər hansı bir konkret maddənin zona quruluşunun kəmiyyət hesablanması çox çətindir. Bu da öz növbəsində kristal qəfəsi potensialının (və ya özü ilə uzlaşan potensialın) konkret analitik ifadəsinin olmaması ilə əlaqədardır. Ona görə də bütün bu cür hesablamalarda adətən əsas düsturlarda yalnız təcrübə yolla hesablanabilən fiziki parametrlər iştirak edir. Belə parametrlər sırasına, məsələn, qadağan olunmuş zonanın eni, effektiv kütlənin qiyməti və s. daxildir.

Biz yuxarıda qeyd etmişdik ki, kristal üçün bir elektronlu məsələ iki cür yaxınlaşma ilə (kvazi-sərbəst və kvazi-bağlı elektron yaxınlaşmaları) həll edilir. Başqa bir üsul bunların əlverişli kombinasiyasından ibarət olan ortoqonallaşdırılmış müstəvi dalğalar metodudur. Burada elektronun kristalda hərəkəti zamanı dalğa funksiyası müstəvi dalğaların kombinasiyası şəklində seçilir və onlardan daxili elektronların atom üçün dalğa funksiyaları çıxılır. Özü də daxili elektronların dalğa funksiyaları güclü rabitəli elektron yaxınlaşmasında olan Blox funksiyasının kombinasiyası şəklində seçilir. Beləliklə, kristalda elektronun dalğa funksiyası atomlar arasındakı fəzədə özünü müstəvi dalğa kimi, dünyanın nöqtələrində isə (atomların ətrafında) atom dalğa funksiyası kimi aparır. Bu halda da məsələnin həlli güclü çətinliklərə rast gəlir. Məsələn üçün bu metodu silisium və germanium kristallarına tətbiq etdikdə Brilliyen zonasının ixtiyari nöqtəsində enerjinin ifadəsini almaq üçün məchulu 146 tərtibli olan bir tənliyi həll etmək lazım gəlir. Məsələ qrup nəzəriyyəsinin tətbiqi ilə həll edilir və yüksək simmetriyaya malik olan nöqtələr üçün kəskin sürətdə sadələşir. Ancaq yenə də 16 dərəcəli tənlik alınır ki, bu da yalnız ədədi hesablamalar yolu ilə həll edilir.

Hazırda maddələrin zona quruluşu barədə olan məlumatlar nəzəri və təcrübə tədqiqatların əsasında alınmışdır və bu tədqiqatların əğlabatan birgə kombinasiyasının nəticəsidir. Aşağıda biz daha çox öyrənilmiş və yarımkəçirici maddələr üçün daha seçiyəvi xassələrə malik olan bir neçə maddənin zona quruluşuna baxacağıq.

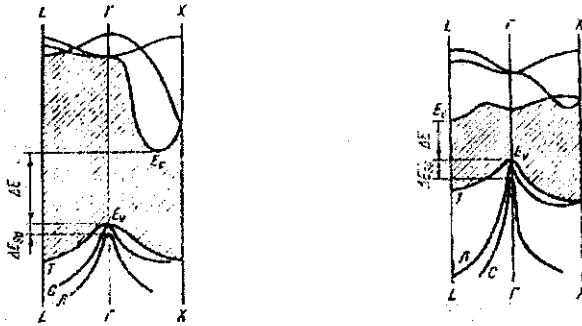
a) Silisium və germanium. Elektron təbəqələrinin quruluşundan (2.17.2) görüldüyü kimi, bu maddələrdə axırıncı, qismən dolu təbəqə, p təbəqəsidir və burada spinləri bir-birinə paralel olan iki elektron yerləşir, yəni əsas hal tripletidir. Silisium və germaniumun zona quruluşu German və başqaları tərəfindən ortoqonallaşdırılmış müstəvi dalğalar metodu ilə Brilliyen zonasında yüksək simmetriyaya malik olan bir sıra nöqtələr

üçün hesablanmışdır. Digər nöqtələr üçün enerjinin $[E(\vec{k})]$ qiymətləri interpolyasiya yolu ilə alınmışdır.

Nəzəri hesablamalar təcrübədə alınan nəticələrlə müqayisə edilmiş, yoxlanılmış və onlara bir sıra düzəlişlər verilmişdir. Aydınır ki, hər iki maddənin keçiricilik və valent zonalarının yaranmasında p təbəqəsi iştirak edir. Ona görə də sıfırncı yaxınlaşmanın Blox funksiyasını tərtib edərkən p halına uyğun gələn (bu hal spin nəzərə alınmadıqda üçqat cırlaşmaya malikdir) dalğa funksiyalarından istifadə etmək lazımdır.

Qarşılıqlı təsir nəticəsində cırlaşma aradan qalxır və yaranan iki zonanın (valent və keçiricilik zonalarının) hər biri üç zolaqdan ibarət olur. Özü də hər iki zona daxilində zolaqlar qismən kəşişir (üst-üstə düşür).

2.24 a və b şəkillərində silisium və germanium üçün $[111]$ və $[100]$ istiqamətlərində enerjinin dalğa vektorundan asılılığı göstərilmişdir. Bu asılılıq müxtəlif istiqamətlər üçün müxtəlifdir. Keçiricilik zonasında (hər iki maddə üçün) enerjinin budaqlarından biri digər ikisindən xeyli aşağıda yerləşmişdir. Bu budağın ən aşağı minimumun (mütləq minimumun) vəziyyəti keçiricilik zonasının dibini təyin edir.



Şəkil 2.24. Silisium (a) və germaniumun (b) enerji zonalarının quruluşu

Silisiumda mütləq minimum $[100]$ istiqamətindədir (Brillyüen zonasının daxilində). Odur ki, 6 dənə bu cür minimum mövcuddur (6 ekvivalent istiqamət olduğu üçün).

Germaniumda mütləq minimum $[111]$ istiqamətindədir (Brillyüen zonasının qurtaracağında), odur ki, ekvivalent minimumların sayı 8-dir.

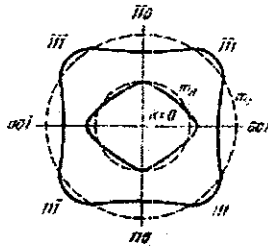
Mütləq minimumların yaxın ətrafında izoenergetik səthlər fırlanma ellipsoidi şəklindədir. Özü də fırlanma oxu böyük ox olub, silisium üçün [100] və germanium üçün [111] istiqaməti ilə üst-üstə düşür. Bu minimumların yaxın ətrafında enerjinin \vec{k} -dan asılılığı belədir:

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2 [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2]}{2m_1} + \frac{\hbar^2 (k_z - k_{0z})^2}{2m_2}, \quad (2.18.1)$$

burada $m_1 = m_2 \neq m_3$ olub, $m_1 = m_2 = m_1$ «eninə», $m_3 = m_1$ «uzununa» effektiv kütlə adlanır, özlərinin də ədədi qiymətləri siklotron rezonansı vasitəsi ilə təcrübədə təyin edilir. Silisium üçün $m_1 = 0,19m_0$, $m_2 = 0,98m_0$ (m_0 - sərbəst elektronun kütləsidir: $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-28} q$). $\frac{m_1}{m_2} = 5,16$ nisbəti izoenergetik səthlərin anizotropiya xassələrini təyin edir. Oxların nisbəti:

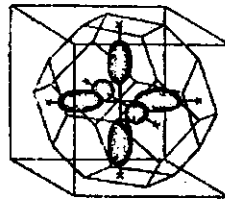
$$\sqrt{\frac{m_1}{m_2}} = 2,27.$$

Minimum nöqtələri Brillüen zonasının daxilində onun sərhədinin yaxınlığında yerləşmişdir. Silisiumun keçiricilik zonası üçün minimum nöqtələrinin yaxın ətrafında izoenergetik səthlərin forması 2.25-ci şəkildə göstərilmişdir.

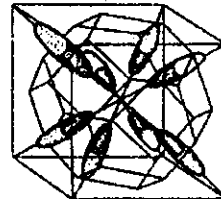


Şək. 2.25

Silisium və germaniumun valent zonasında izoenergetik səthlərin (001) müstəvisi ilə kəsiyi



a)



b)

Şək. 2.26

Silisium (a) və germaniumun (b) keçirici zonasında izoenergetik səthlərin vəziyyəti

Germanium üçün: $m_1 = m_2 = m_1 = 0,822m_0$, $m_3 = m_1 = 1,58m_0$

$$\frac{m_3}{m_1} = \frac{m_2}{m_1} = 19,3; \quad \sqrt{\frac{m_3}{m_1}} = 4,4.$$

Germanium üçün keçiricilik zonasında minimumların yaxın ətrafında izoenergetik səthlərin forması 2.25-ci şəkildə göstərilmişdir. Minimum nöqtələri Brillyüen zonasının sərhədinə düşdüyü üçün birinci Brillyüen zonasında hər bir ellipsoidin yarısı qalır. Odur ki, 8 ekvivalent nöqtəyə 4 tam ellipsoid təfəvüq edir, yəni keçiricilik zonasında 8 deyil, 4 tam ellipsoid mövcuddur.

Silisiumun və germaniumun valent zonasının maksimumu enerjinin hər üç budağı üçün Brillyüen zonasının mərkəzində $\vec{k} = 0$ nöqtəsində yerləşmişdir. Burada iki zona bir-biri ilə üst-üstə düşür, yəni spin cırılması nəzərə alınmasa, ikiqat cırılma mövcuddur, üçüncü zolaq isə elektronun spini ilə onun orbital hərəkətinə uyğun gələn maqnit sahəsinin qarşılıqlı təsiri nəticəsində (spin – orbital qarşılıqlı təsiri) parçalanaraq, o biri iki zolaqdan aralanmışdır. Spin – orbital qarşılıqlı təsiri nəticəsində parçalanmanın qiyməti silisium üçün 0,035 eV, germanium üçün isə 0,28 eV-dür.

Enerjinin dalğa vektorundan asılılığı birinci iki budaq üçün $\vec{k} = 0$ maksimum nöqtəsinin yaxın ətrafında (2.18.1) ifadəsinə nisbətən daha mürəkkəb olub, belə bir düsturla təyin olunur:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = E(0) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 \pm \sqrt{B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2)} \right], \quad (2.18.2)$$

burada m_0 - sərbəst elektronun kütləsi, A, B, C - ölçüsüz sabitlərdir. Silisium üçün $A = 4,1 \pm 0,2$; $B = 1,6 \pm 0,2$; $C = 3,3 \pm 0,5$, germanium üçün:

$$A = 13,0 \pm 0,2; B = 8,9 \pm 0,1;$$

$C = 10,3 \pm 0,2$ -dir. Bu halda izoenergetik səthlər ellipsoid deyil, deformatsiyaya uğramış («büzmələnməmiş») kürədir (bax: şəkil 2.26). Odur ki, enerji k_x, k_y, k_z -dən birincisi asılı olsa da (2.18.2), bu asılılığın xarakteri elədir ki, o, effektiv kütlə tenzoru mövhumundan istifadə etməyə imkan vermir. Əgər \vec{k} fəzasında polyar oxu \vec{k}_i ilə üst-üstə düşən sferik koordinat sistemindən istifadə etsək, onda (2.18.2) ifadəsini belə yazı bilərik:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = E(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left[A \pm \sqrt{B^2 + C^2 \sin^2 \theta (\sin^2 \varphi \cdot \cos^2 \varphi \cdot \sin^2 \theta + \cos^2 \theta)} \right]. \quad (2.18.3)$$

Bucaqlardan asılı olan vuruğun bütün bucaqlar üzrə orta qiymətini götürsək:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin^2 \theta (\sin^2 \varphi \cdot \cos^2 \varphi \cdot \sin^2 \theta + \cos^2 \theta) \sin \theta d\theta d\varphi = \\
& = \frac{1}{4\pi} \left[\int_0^{2\pi} \left(\int_0^{\pi} \sin^3 \theta d\theta \right) \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi d\varphi + \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \cos^2 \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \right] = \\
& = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{4\pi}{15} + \frac{8\pi}{15} \right] = \frac{1}{5}.
\end{aligned} \tag{2.18.4}$$

Onda:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = E(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left[A \pm \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{2}} \right]. \tag{2.18.5}$$

Beləliklə, «büzmələnməmiş» səthləri biz küre səthlərinə gətirmiş olduq. Onda dəşiklərin effektiv kütləsi üçün belə bir skalyar kəmiyyət alırıq:

$$m_p^* = \frac{m_0}{A \pm \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}}, \tag{2.18.6}$$

yəni hər enerji budağının özünəməxsus skalyar effektiv kütləsi vardır:

$$m_{1p}^* = \frac{m_0}{A - \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}}; \quad m_{2p}^* = \frac{m_0}{A + \sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}}. \tag{2.18.7}$$

(2.18.7) ifadəsindən görüldüyü kimi $m_{1p}^* > m_{2p}^*$. Ona görə böyük effektiv kütləyə uyğun gələn zonada olan dəşiklərə ağır dəşiklər, kiçik effektiv kütləyə uyğun gələn zonada olan dəşiklərə isə yüngül dəşiklər deyilir. Məsələn, silisium üçün uyğun parametrlərin qiymətlərini (2.18.7)-də yerinə yazsaq:

$$m_{1p}^* = 0,52m_0,$$

$$m_{2p}^* = 0,16m_0,$$

$$m_{1p}^* / m_{2p}^* = 3,3.$$

Təcrübədən alınan qiymətlər:

$$\frac{m_{1p}^*}{m_{2p}^*} = 3,1, \quad m_{1p}^* = 0,49m_0, \quad m_{2p}^* = 0,16m_0.$$

Germanium üçün təcrübədən alınan qiymətlər belədir:

$$m_{1p}^* = 0,34m_0, \quad m_{2p}^* = 0,04m_0, \quad \frac{m_{1p}^*}{m_{2p}^*} = \sim 8.$$

Valent zonasının üçüncü budağı üçün enerjinin k -dan asılılığı kvadratikdir:

$$E_3(\vec{k}) = -E_{30} - \frac{\hbar^2}{2m_0} Ak^2, \tag{2.18.8}$$

burada E_{s_0} -spin-orbital parçalanmanın qiyməti olub, silisium üçün 0,035 eV, germanium üçün isə 0,28 eV-dur. (2.18.8)-dən görünür ki, üçüncü qol üçün effektiv kütlə skalyar kəmiyyətdir: $m_{s,p}^* = \frac{m_0}{A}$, silisium üçün $m_{s,p}^* = 0,24m_0$, germanium üçün $m_{s,p}^* = 0,077m_0$. Aydın ki, bu budaq üçün izoenergetik səthlər kürə şəklindədir.

b) İntermetallik birləşmələr. III və V qrup elementlərinin birləşməsindən yaranan ($A^{III}B^V$ tipli birləşmələr) maddələr (bunlara intermetallik birləşmələr deyilir) yarımkəçiricilik xassəsinə malikdirlər. Bu sinfə mənsub olan birləşmələr bunlardır: $GaAs$, $InSb$, GaP , $GaSb$ və s.

İntermetallik birləşmələrin zona quruluşunun nəzəri hesablanması dördüncü qrup elementlərinin zona quruluşu ilə müqayisəli surətdə aparılır. Bu onunla əlaqədardır ki, $A^{III}B^V$ tipli birləşmələr sink sulfid (ZnS) kristal quruluşu üzrə kristallaşır. ZnS kristal quruluşu isə almaz quruluşundan yalnız A və B tipli atomların növbə ilə bir-birini əvəz etməsi ilə fərqlənir. Bunun nəticəsidir ki, intermetallik birləşmələrin kristal qəfəsinin periodik sahəsi inversiya mərkəzinə malik deyil, yəni $U(\vec{r}) \neq U(-\vec{r})$. Məsələnin həllində intermetallik birləşmənin kristal qəfəsinin periodik potensialını tərtib edərkən zona quruluşu məlum olan uyğun IV qrup elementinin potensialından istifadə olunur. $A^{III}B^V$ birləşməsinin potensialı uyğun IV qrup elementinin potensialı ilə hər hansı həyəcanlaşdırıcı antisimmetrik potensialın cəmi kimi götürülür. IV qrup elementinin məlum quruluşunun bu həyəcanlaşdırıcı sahənin (potensialın) təsiri altında nə kimi dəyişikliyə uğraması müəyyən edilir. Beləliklə, $A^{III}B^V$ tipli birləşmənin potensialı belə olur:

$$U^{III-V}(\vec{r}) = U_s^{IV-IV}(\vec{r}) - U_a^{IV-IV}(\vec{r}) + [\Delta U_s(\vec{r}) + \Delta U_a(\vec{r})],$$

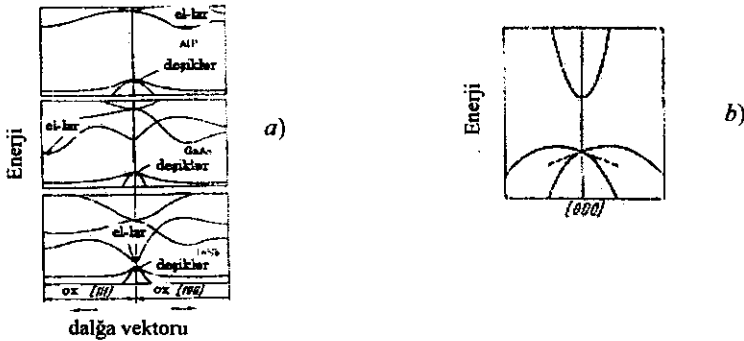
burada $U_s^{IV-IV}(\vec{r}) = U_s^{IV-IV}(-\vec{r})$, $U_a^{IV-IV}(\vec{r}) = -U_a^{IV-IV}(-\vec{r})$, yəni U_s və $U_a - A^{III}B^V$ «birləşməsi» üçün potensialın uyğun olaraq simmetrik və antisimmetrik hissəsi, ΔU_s və ΔU_a isə həyəcanlaşmanın simmetrik və antisimmetrik hissəsidir. Məsələnin həllində BN birləşməsi üçün almazın zona quruluşu (karbonun «C» almaz modifikasiyasının), $GaAs$ üçün Ge -un, AlP üçün Si -un, $InSb$ üçün $\alpha - Sn$ -un quruluşu əsas götürülür.

2.27 şəkildə $A^{III}B^V$ tipli birləşmələrdən bir neçəsinin zona quruluşu gös-tərilmişdir. Burada keçiricilik zonasının quruluşu keyfiyyətcə silisium və germaniumun zona quruluşundan fərqlənmir. Valent zonası da üç budaqdan (zonadan) ibarətdir, özü də üçüncü zona (V_3) spin orbital qarşılıqlı təsir nəticəsində parçalanaraq o biri iki zonadan aralanmışdır (aşağı düşmüşdür). İntermetallik birləşmələrin valent zonasının fərqli cəhəti on-

dan ibarətdir ki, yüngül və ağır deşiklərə uyğun gələn birinci iki zona (V_1 və V_2) potensial sahənin antisimmetrik hissəsi ilə əlaqədar olaraq, Brillyüen zonasının mərkəzində ($\vec{k} = 0$) parçalanır. Odur ki, yüngül və ağır deşiklərin enerjisinin maksimumu bir-birinə nisbətən sürüşür və Brillyüen zonasının mərkəzindən bir qədər kənara düşür. Özü də ola bilər ki, hər iki maksimum, yaxud da onlardan biri $\vec{k} = 0$ nöqtəsinə nəzərən sürüşmüş olsun. Ancaq bir qayda olaraq sürüşmə o qədər kiçik olur ki, $\vec{k} = 0$ nöqtəsində və maksimum nöqtəsində enerjinin qiymətləri bir-birindən 1eV-un yüzədə biri və ya mində biri qədər fərqlənir. Ən az sürüşmə *InSb* və *InAs*-də müşahidə olunur.

2.27. b şəkilində *InSb* birləşməsinin valent zonasının quruluşu bir qədər təfəsilatı ilə verilmişdir. Göründüyü kimi, valent zonasının maksimumu ilə keçirici zonanın mütləq minimumu eyni zamanda Brillyüen zonasının mərkəzinə ($k = 0$) düşür.

Minimumun yaxın ətrafında enerji \vec{k} -dan parabolik şəkildə asılıdır, özü də zonanın dibində yerləşən elektronun effektiv kütləsi çox kiçik olub, $m_e^* = 0,013 m_0$ -dır (siklotron rezonansı ölçmələrindən alınmış qiymətdir).



Şəkil 2.27. A^{III}B^V tipli birləşmələrin zona quruluşu (a) və valent zonasının quruluşu (b)

Enerjinin nisbətən böyük qiymətləri üçün keçiricilik zonası artıq parabola şəklində olmur və bunun əyriliyi azalır. Odur ki, elektronun effektiv kütləsi bu zonanın dolma dərəcəsindən asılı olur. Bu isə öz növbəsində temperaturdan və aşqarların konsentrasiyasından asılıdır.

Keyn (Kane) *InSb* birləşməsində keçiricilik və valent zonalarının qarşılıqlı təsirdə olmasını (qadağan olunmuş zonanın eni kiçik olduğu üçün) nəzərə alaraq göstərmişdir ki, müxtəlif zonalər üçün enerjinin ifadəsi belə bir kub tənlikdən hesablanmalıdır:

$$\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}\right) \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \Delta E_g\right) \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \Delta E_g + E_{s0}\right) - k^2 P^2 \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \Delta E_g + \frac{2}{3} E_{s0}\right) = 0, \quad (2.18.9)$$

burada E - yükdaşıyıcının enerjisi, E_{s0} - spin-orbital parçalanma, P - keçiricilik və valent zonasının qarşılıqlı təsirini nəzərə alan sabitdir.

Effektiv kütlə çox kiçik olduqda ($m_n^* \ll m_0$) $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ həddini nəzərə almamaq olar. Onda (2.18.9)-dan:

$$k^2 = \frac{E(E + \Delta E_g)(E + \Delta E_g + E_{s0})}{P^2 \left(E + E_g + \frac{2}{3} E_{s0}\right)}, \quad (2.18.10)$$

Bu asılılığı üç zonalı Keyn modelindən alınmış ifadə adlandırırlar.

InSb birləşməsində E_{s0} -nun böyük olduğunu nəzərə alıb, bir sıra sadələşdirmə apardıqdan sonra (2.18.9)-dan keçiricilik zonası üçün enerjinin dalğa vektorundan asılılığını belə ifadə edə bilərik:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} (1 - \alpha k^2), \quad (2.18.11)$$

burada $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_n^* \Delta E_g}$ keçiricilik zonasının paraboliklikdən kənara çıxmasını xarakterizə edən parametrdir.

Yuxarıda göstərilən misallar yarımkəçiricilərin zona quruluşunun əsas səciyyəvi cəhətlərini nümayiş etdirir. Ona görə də biz burada başqa maddələrin zona quruluşlarını göstərməyəcəyik.

§ 2.19. Kvazi-zərrəciklər haqqında anlayış

Biz elektronun kristalda hərəkətinə baxarkən enerjinin icazə verilən qiymətlərinin zonalər şəklində olmasını kristal potensialının periodikliyinin nəticəsi kimi, yəni atomların uzaq məsafələrdə müntəzəm düzülüşünün nəticəsi kimi aldıq. Bunu adətən böyük məsafələrdə nizam-

lılıq adlandırılır. Lakin yarımkeçiricilərdə enerjinin zonalı xarakteri böyük məsafələrdə nizamlılığın pozulduğu hallarda da müşahidə olunur, məsələn, yarımkeçirici əriyib maye halına keçdikdə (maye halında yalnız kiçik məsafələrdə nizamlılıq mövcuddur) çox vaxt enerjinin zonalı xarakteri saxlanılır. Bu onu göstərir ki, enerjinin zonalar şəklində alınması üçün «uzaq nizamlılıq» lazımı şərt olmayıb, əslində yalnız kafi şərtlərdən biridir ki, o da bir elektronlu məsələni həll etməyə imkan verir. Görünür ki, kafi şərti yaxın məsafələrdə potensialın quruluşu (yaxın nizam) təşkil edir, ancaq bu cür yaxınlaşma çox cisim məsələsini həll etməyi tələb edir. Çox cisim məsələsinin çətinlikləri haqda isə qabaqca danışmışdıq.

Sadə fiziki mühakimələrdən də aydın olur ki, sərbəst atomlar birləşib kristal əmələ gətirdikdə ayrı-ayrı atomların elektronlarının eyni (cırılmış) hallar, parçalanma (cırılmanın aradan çıxması) nəticəsində zonalar əmələ gətirməlidir.

Məhz yaxın nizamın rolu baxımından aşqar zonaları haqda danışmaq olar. Çünki aşqar atomları kristalda statistik paylanır və onların uzaq məsafələrdə nizamlı düzülməsi (periodikliyi) haqda heç söhbət ola bilməz.

Bərk cismin fiziki xassələrini təsvir etmək bezi kvazi-zərrəciklər anlayışını daxil etməklə kəskin surətdə asanlaşır. Belə zərrəciklər mühtidən kənarında (vakuumda) sərbəst şəkildə mövcud ola bilməz. Əslində kristalda elektrik keçiriciliyi yaradan və müəyyən effektiv kütləyə və kvazi-impulsa malik olan elektron və deşik bu cür kvazi-zərrəciklərdir.

Yüklü kvazi-zərrəciklərdən (yəni elektrik yükünün daşınmasında iştirak edən zərrəciklərdən) başqa, bərk cisimdə başqa növ – yükü olmayan kvazi-zərrəciklər də ola bilər. Bu cür zərrəciklərin əmələ gəlməsinin mümkünlüyünü izah etmək üçün məxsusi yarımkeçiricidə elektron – deşik cütünün yaranma mexanizminə nəzər salaq. Elektron qadağan olunmuş zonanın eninə bərabər enerji udmaqla keçiricilik zonasına keçir və beləliklə keçiricilik zonasında bir sərbəst elektron və valent zonasında bir sərbəst deşik yaranır ki, onlar da kristalın elektrik keçirməsində iştirak edir. Udulan enerji qadağan olunmuş zonanın enindən kiçikdirsə, onda kristalda eksiton adlanan xüsusi hal yarana bilər (excitation - ingiliscə həyəcanlanma deməkdir). Eksiton halının mövcud olmasını birinci dəfə Frenkel (1931-ci il) demişdir. Eksiton bir-biri ilə kulon qarşılıqlı təsirində olan elektron və deşiyin elə rəbitəli halıdır ki, o, müəyyən kvazi-impulsa və irəliləmə hərəkəti enerjisinə malikdir və bütün kristal boyunca hərəkət edə bilər. Eksitonun əmələ gəlməsini başqa cür də təsəvvür etmək olar. Məxsusi yarımkeçiricidə sərbəst elektron və sərbəst deşik yarandıqdan

sonra onların arasında kulon qarşılıqlı təsir (cazibə) qüvvəsi yaranır. Bunun nəticəsində hidrogen atomuna bənzər bir «atom» - eksiton yaranmış olacaq, ancaq burada müsbət yüklü zərrəcik proton deyil, kütləsi elektronun kütləsi tərtibində olan müsbət yüklü deşikdir.

Elektron – deşik cütünün eksiton halında hərəkəti elektrik cərəyanının yaranmasına səbəb olmur və həm də kristalın elektrik keçirməsinə təsir etmir. Odur ki, işığın eksiton yaratmaqla nəticələnən udulması fotokeçiriciliyin yaranmasına səbəb olmur. Yaranmış eksiton kristalın daxilində xaoslu diffuziya hərəkətində olur və bu hal iki şəraitdən biri yarananda davam edir: 1) eksiton əmələ gətirən zərrəciklərdən biri kristal pozğunluqlarından biri tərəfindən tutulur. Bu zaman digər zərrəcik müvafiq zonada sərbəst hala keçir; 2) elektronla deşik rekombinasiya edir. Bu zaman eksiton yaranarkən udulan enerji ya işıq kvantı şəklində ayrılır və ya kristal qəfəsinin istilik enerjisinə çevrilir. Aydındır ki, hər iki halda eksiton pozulur.

Ümumi halda elektronun yaranması məsələsinin həlli bir elektronlu yaxınlaşmadan kənara çıxır. Lakin keçiricilik zonasındaki elektronla valent zonasındaki deşiyin qarşılıqlı təsirini nəzərə aldıqda eksiton həyəcanlanmasını zolaq nəzəriyyəsinə daxil etmək mümkündür (qeyd edək ki, bu cür yaranan eksitona Mott və ya Vanye eksitonu deyirlər). Əgər belə eksitonun ölçüləri kristal sabitindən kifayət qədər böyükdürsə, onda elektron-deşik cütünün qarşılıqlı təsirinə böyük dəqiqliklə dielektrik mühitdə (burada dielektrik mühit rolunu əsas kristal qəfəsi oynayır) iki yüklü zərrəciyin kulon qarşılıqlı təsiri kimi baxa bilərik. Özü də burada mühitin dielektrik sabiti olaraq optik (yüksək tezlikli) dielektrik sabitini götürmək lazımdır. Çünki elektron və deşik elə «ətalətsiz» hərəkət edirlər ki, onların kulon qarşılıqlı təsirini xarakterizə edən operatora, kristalın ionlarının yer dəyişməsi ilə əlaqədar olan poyarizasiyanı daxil etməyə ehtiyac yoxdur.

Eksitonda elektron və deşiyin vəziyyətini xarakterizə edən radiusvektorları \vec{r}_n və \vec{r}_p , onların effektiv kütlələrini m_n^* və m_p^* ilə işarə etsək, eksitonun halını təsvir edən Şredinger tənliyini belə yaza bilərik:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \Delta_n - \frac{\hbar^2}{2m_p^*} \Delta_p - \frac{e^2}{\epsilon_{0n} |\vec{r}_n - \vec{r}_p|} \right] \psi(\vec{r}_n, \vec{r}_p) = E \psi(\vec{r}_n, \vec{r}_p). \quad (2.19.1)$$

Burada tənliyin sol tərəfindəki birinci və ikinci hədd elektronun və deşiyin kinetik enerjisini (Δ_n və Δ_p uyğun olaraq elektronun və deşiyin koordinatlarına görə götürülmüş Laplas operatorudur), üçüncü hədd isə elektron-deşik cütünün qarşılıqlı təsir enerjisini xarakterizə edir.

Bu sistemi elektron-deşik cütünün etalət mərkəzinin radius-vektoru:

$$\vec{R} = \frac{m_n^* \vec{r}_n + m_p^* \vec{r}_p}{m_n^* + m_p^*} \quad (2.19.2)$$

və elektronun deşiyə nəzərən vəziyyətini təyin edən $\vec{\rho}$ radius-vektoru ilə təsvir etmək olar:

$$\vec{\rho}_n = \vec{r}_n - \vec{r}_p. \quad (2.19.3)$$

Göstərmək olar ki, təzə daxil etdiyimiz dəyişənlərlə ifadə etdikdə (2.19.1) tənliyi belə olar:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \Delta_{\vec{\rho}} - \frac{e^2}{\epsilon_{0n}\rho} \right] \psi(\vec{R}, \vec{\rho}) = E \psi(\vec{R}, \vec{\rho}), \quad (2.19.4)$$

burada $M = m_n^* + m_p^*$, m_{np}^* isə elektron-deşik cütünün gətirilmiş kütləsidir:

$$m_{np}^* = \frac{m_n^* \cdot m_p^*}{m_n^* + m_p^*} \quad (2.19.5)$$

(2.19.4) tənliyi dəyişənlərin ayrılması yolu ilə həll edilir:

$$\psi(\vec{R}, \vec{\rho}) = \psi_1(\vec{R}) \cdot \psi_2(\vec{\rho}). \quad (2.19.6)$$

(2.19.6)-ü (2.19.4)-də yerinə yazıb, hər iki tərəfi $\psi(\vec{R}, \vec{\rho})$ -ya bölsək:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{1}{\psi_1(\vec{R})} \cdot \Delta_{\vec{R}} \psi_1(\vec{R}) - \frac{1}{\psi_2(\vec{\rho})} \left[\frac{\hbar^2}{2m_{np}^*} \Delta_{\vec{\rho}} \psi_2(\vec{\rho}) + \frac{e^2}{\epsilon_{0n}\rho} \psi_2(\vec{\rho}) \right] = E. \quad (2.19.7)$$

Sol tərəfin birinci həddi yalnız R -dən, ikinci həddi isə yalnız ρ -dan asılı olduğu halda onların cəmi sabit bir E kəmiyyətinə bərabərdir. Onda hər hədd ayrılıqda sabit kəmiyyətə bərabər olmalıdır (\vec{R} və $\vec{\rho}$ bir-birindən asılı deyil):

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} \psi_1(\vec{R}) = T^{*k} \psi_1(\vec{R}), \quad (2.19.8)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{np}^*} \Delta_{\vec{\rho}} - \frac{e^2}{\epsilon_{0n}\rho} \right] \psi_2(\vec{\rho}) = E^{*k} \psi_2(\vec{\rho}). \quad (2.19.9)$$

Aydınır ki:

$$E = T^{*k} + E^{*k}. \quad (2.19.10)$$

(2.19.8) tənliyi sərbəst elektron üçün Şredinger tənliyini xatırladır və kütləsi $M = m_n^* + m_p^*$ olan zərrəciyin (eksitonun) bütün kristal boyunca sərbəst hərəkətini (translyasiyasını) təsvir edir. Bu tənliyin həlli müstəvi dalğa şəklindədir, enerji:

$$T^{ek} = \frac{\hbar^2 |\vec{k}^{ek}|^2}{2(m_n^* + m_p^*)} \quad (2.19.11)$$

düsturu ilə ifadə olunur. Burada eksitonun dalğa vektoru belə təyin olunur:

$$k^{ek} = \frac{\sqrt{2(m_n^* + m_p^*)}}{\hbar} \cdot \sqrt{T^{ek}}. \quad (2.19.12)$$

Beləliklə, (2.19.8) tənliyi eksitonun ətalət mərkəzinin hərəkətini təsvir edir. Bu hərəkətə təvafüt edən kinetik enerji T^{ek} -dir. Digər tənlik – (2.19.9) eksitonun ətalət mərkəzinə nəzərən daxili (hidrogenə bənzər) hərəkətini təsvir edir. Burada enerjinin məxsusi qiymətləri hidrogen atomunda olduğu kimi təyin olunur. Lakin hidrogen atomu halında enerjinin hesablanması üçün başlanğıc olaraq öz atomundan sonsuz məsafəyə qədər uzaqlaşmış və sükunətdə olan elektronun enerjisi götürülür. Eksitonda isə başlanğıcı elə seçmək lazımdır ki, $n = \infty$ və $\rho = \infty$ olduqda $E^{ek} = E_v + E_c$ alınsın (n - baş kvant ədədi, E_v və E_c isə enerjinin valent zonasının maksimumuna və keçiricilik zonasının minimumuna uyğun gələn qiymətləridir). Onda eksiton üçün belə düstur alarıq:

$$E_n^{ek} = E_v + E_c - \frac{I}{n^2} \cdot \frac{m_{np}^* e^4}{2\hbar^2 \varepsilon_{0n}^2} = E_v + E_c - \frac{13,5}{\varepsilon_{0n}^2} \left(\frac{m_{np}^*}{m_0} \right) \cdot \frac{I}{n^2} (eV). \quad (2.19.13)$$

Enerjinin valent zonasının maksimumundan hesablasaq ($E_v = 0$) onda eksitonun əsas halı üçün ($n = 1$) alarıq:

$$E_1^{ek} = \Delta E_g - \frac{13,5}{\varepsilon_{0n}^2} \cdot \left(\frac{m_{np}^*}{m_0} \right) (eV). \quad (2.19.14)$$

(2.19.13) və (2.19.14) ifadələrindən görünür ki, eksitonun enerji səviyyələri qadağan olunmuş zonada keçiricilik zonasının yaxınlığında yerləşir.

Eksitonun Bor orbitlərinin radiuslarının qiyməti belə düsturla təyin olunur:

$$a_n^{ek} = \frac{n^2 \hbar^2}{e^2 m_{np}^*} \varepsilon_{0n} = 0,53 n^2 \left(\frac{m_0}{m_{np}^*} \right) \varepsilon_{0n} (\text{Å}). \quad (2.19.15)$$

Yükdaşıyıcıların effektiv kütləsi nə qədər az və dielektrik sabitinin (ε_{0n}) qiyməti nə qədər çox olsa, onda eksitonun enerjisi də bir o qədər az və Bor orbitinin radiusu bir o qədər çox olar. Odur ki, təcrübədə böyük radiuslu eksitonları müşahidə etmək daha çətin olur. Çünki belə eksitonların enerji səviyyələri keçiricilik zonasına çox yaxın olur (əz qala onunla

birdirlər). Radiusları böyük olan (kristal qəfəsinin parametrinə nisbətən) eksitona Mott eksitonu deyirlər.

Eksitonun ümumi enerjisi:

$$E_{\text{ex}} = T^{\text{ex}} + E^{\text{ex}} \quad (2.19.16)$$

olduğu üçün hər bir enerji səviyyəsi eni kifayət qədər böyük olan zonaya çevrilməlidir. Lakin təcrübədə işıqın eksiton tərəfindən udulması zamanı onun enerji səviyyələri çox ensiz olan xətlər şəklində müşahidə olunur. Bu isə öz növbəsində eksitonun dalğa vektorunun seçmə qaydası ilə əlaqədardır.

Eksitonun digər növü kiçik radiuslu və ya güclü rabitəli eksitondur. Bunlara adətən Frenkel eksitonu deyirlər. Bu cür eksitonları güclü rabitəli elektron yaxınlaşması ilə təsvir etmək olar. Bu halda eksitonun enerjisinin məxsusi qiymətləri üçün alınan ifadə güclü rabitəli elektron üçün alınan ifadə kimi olur. Beləliklə, eksitonun enerji spektri ayrı-ayrı zonalardan ibarət olur.

İon rabitəsi üstünlük təşkil edən kristallarda daha bir həyəcanlaşmış hal kvazi-zərrəcik vasitəsilə təsvir edilə bilər. Bu cür kristallarda keçiricilik elektronu (və ionlaşmış aşqar atomu) özünün elektrik sahəsi vasitəsilə öz yaxın ətrafını polyarlaşdırır, həm də bu polyarlaşdırma mühitin dielektrik sabiti nə qədər böyük olsa, bir o qədər güclü olur. Polyarlaşma nəticəsində elektronun enerjisi azalır, yeni elektronun yaxın ətrafında potensial çuxuru yaranır. Beləliklə, öz-özü ilə əlaqələnen və bütün kristal boyunca hərəkət edə bilən bir hal yaranır. Öz-özü ilə əlaqələnmə ondan ibarət olur ki, lokallaşmış elektron kristalı polyarlaşdırır, kristalın polyarlaşması isə öz növbəsində elektronun lokallaşmış halının saxlanmasına kömək edir. Elektron hərəkət etdikdə kristalın polyarlaşmasını da öz «arxasınca» aparır (sövq edir). Belə ki, elektronun öz yolunda yeni rast gəldiyi oblastları polyarlaşdırır və qabaqca polyarlaşmış oblastlar isə elektron oradan uzaqlaşdığı üçün artıq öz əvvəlki vəziyyətinə qayıdır. Özlərinin polyarlaşdırmış olduqları mühitlə hərəkət edən bu cür sərbəst yükləri ilk dəfə S.İ.Pekar (1946-cı ildə) tədqiq etmişdir. O, kristalda yaranan belə halı polyaron adlandırmışdır. Deməli, polyaron dedikdə elektron və onun öz yaxın ətrafında kristalda polyarlaşdırdığı oblastdan ibarət sistemi başa düşmək lazımdır.

Qeyd edək ki, polyaronun yaranmasında kristalın tam polyarlaşması deyil, onun yalnız ağır ionların yerdəyişməsi ilə əlaqədar olan ətalətli hissəsi (relaksasiya müddəti 10^{-13} san olan hissəsi) iştirak edir. Elektron təbəqələrinin (orbitinin) polyarlaşması ilə bağlı olan (relaksasiya müddəti 10^{-15} san olan) digər hissəsi isə ətalətsiz olaraq sərbəst elektronla bərabər

hərəkət edir və beləliklə, birbaşa kristal tərəfindən elektrona təsir edən öz-özü ilə əlaqələnen periodik potensialın içərisinə daxil olur.

Polyaron halı kristalda bütöv zona əmələ gətirir və polyaron bu zonada hərəkət edir. Özü də polyaronun bu zonada hərəkəti elektronun keçiricilik zonasında hərəkəti zamanı tabe olduğu qanunlarla eyni olur. Ancaq burada təkcə bir şərtin ödənilməsi tələb olunur ki, mühitin polyarlaşması elektronun yerdəyişməsindən geri qalmasın (çox ətalətli olmasın).

Elektronun özünün «qazmış» olduğu çuxurla qarşılıqlı təsir enerjisi istilik enerjisindən böyükdürsə, onda polyaronda rabitə kifayət qədər güclüdür və burada elektrona keçiricilik zonasında olmaqda, ondan aşağıda qadağan olmuş zonada yerləşən polyaron halında olmaq enerji cəhətdən daha əlverişlidir. Keçiricilik zonasında elektronların sayını n_e və polyaron halındakı sayı n_p , polyaronun yaranma enerjisinin ϵ_p ilə işarə etsək onda:

$$\frac{n_e}{n_p} \sim e^{\frac{\epsilon_p}{kT}}. \quad (2.19.17)$$

Qeyd etmək lazımdır ki, polyaron zonası keçiricilik zonasından aşağıda yerləşir və eni də keçiricilik zonasının eninə nisbətən kiçikdir; eləcə də özü ilə polyarlaşmış «kürk» aparən elektronun (polyaronun) uyğun zonadakı effektiv kütləsi keçiricilik zonasının elektronuna nisbətən kifayət qədər böyük ola bilər. Buna uyğun olaraq polyaronun yürüklüyünün temperaturdan asılılığı öz xarakterinə görə elektronunkindən tamamilə fərqlənir. Polyaron halı üçün sıçrayış («hoppənma») yolu ilə elektrikkeçirmə mexanizmi xarakterikdir. Bunu izah etmək üçün kristal qəfəsinin hər hansı bir düyün nöqtəsinin yaxınlığında lokallaşmış polyaron (polyaron paketi) təsəvvür edək. Translyasiya simmetriyasına malik olmayan bu cür hal dayanıqlı ola bilməz. O, ya keçiricilik zonasının elektronu kimi (lakin daha böyük effektiv kütlə ilə) bütün kristal boyunca tunnel keçidi ilə hərəkət edəcək (dalğa paketi bütün kristal üzrə «yayı-lacaq»), ya da heç bir enerji sərf etmədən onun qonşuluğunda kristal qəfəsinin istilik rəqsələrinin yaratmış olduğu çuxura düşəcək. Müəyyən bir effektiv «oturaqlıq» müddəti τ_1 -lə, xarakterizə olunan birinci halın keçid ehtimalı W_1 birinci yaxınlaşmada temperaturdan asılı deyil. τ_2 müddətilə xarakterizə olunan ikinci halın ehtimalı W_2 isə temperaturdan eksponensial asılı olacaq, çünki burada «boş» çuxurun yaranma ehtimalı W_2 temperaturdan asılı olaraq eksponensial artır:

$$W_2 \sim e^{\frac{\epsilon_p}{kT}}, \quad (2.19.18)$$

burada ε'_n - boş çuxurun yaranma enerjisidir. Polyaronun aqibəti bu iki halın hansının üstünlük təşkil etməsindən asılı olacaq. Kifayət qədər aşağı temperaturalarda istilik enerjisinin hesabına «boş» çuxurun yaranma ehtimalı azdır. Ona görə $W_1 \gg W_2$ və $\tau_1 \ll \tau_2$. Deməli, təsadüfən təklənmiş (lokalizasiya olunmuş) polyaron τ_1 müddətindən sonra yenə də zona elektronuna çevriləcək, istilik rəqsləri isə zona elektronunun hərəkətinə mane olur. Onda bu şəraitdə temperaturun artması ilə polyaronun yürüklüyü azalır. Yüksək temperaturalarda, əksinə, boş çuxurların yaranma ehtimalı böyükdür. Ona görə də $W_2 \gg W_1$ və $\tau_1 \ll \tau_2$. İstilik rəqslərinin intensivliyi artdığı üçün boş çuxurlar çox tez-tez yaranacaq və polyaron da onların birindən digərinə «sıçrayıb» keçəcək. Artıq $W_1 \ll W_2$ olduğu üçün polyaronun yerdəyişməsi (istər diffuziya nəticəsində, istərsə də sahənin təsiri ilə) əsasən ikinci mexanizm üzrə olacaq. Buna sıçrayış (və ya hoppanma) mexanizmi deyirlər. Bu halda polyaronun yürüklüyü temperaturun artması ilə eksponensial olaraq artacaq:

$$\mu \sim e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}. \quad (2.19.19)$$

Bu ifadə öz şəklinə görə ion keçiriciliyində yürüklüyün temperaturdan asılılığına oxşayır. Odur ki, yuxarıda şərh etdiyimiz mexanizm buna (ion keçiriciliyinə) uyğun olaraq sıçrayış mexanizmi adlanır. Bir də qeyd etmək lazımdır ki, polyaron üçün yürüklüyün temperaturdan eksponensial asılılığı qonşuluqda kifayət qədər dərin çuxur yaranması ehtimalı ilə bağlıdır, özü də ε'_n - çuxurun dərinliyi yox, onun yaranma enerjisidir.

Lokalizasiya olunmuş polyaron kristal qəfəsinin hər hansı bir qüsurunun (defektinin) yaxınlığında «ilişib» qala bilər. Belə hal defekt tərəfindən tutulmuş elektronla tamamilə eynidir.

Kvazi-zərrəciyin başqa bir növü də kristal qəfəsinin istilik rəqslərinin yayılmasına uyğun gələn dalğaları təsvir edən yüksüz zərrəciklərdir. Kristalda atomların istilik rəqslərinin yayılması nəticəsində bir-birindən dalğa uzunluqları ilə fərqlənən küllü miqdarda durğun dalğalar mövcuddur. Işıqın korpuskulyar nəzəriyyəsində müəyyən dalğa uzunluğuna malik olan hər bir işıq dalğasını müəyyən enerjiyə malik bir zərrəciklə-fotonla əvəz etmək mümkün olduğu kimi, bərk cisimlər nəzəriyyəsində də istilik rəqslərinin müəyyən dalğa uzunluqlu hər bir durğun dalğasını uyğun enerjiyə malik bir zərrəciklə əvəz etmək mümkündür. Bu zərrəciyə fonon deyirlər. Beləliklə, kristal qəfəsində istilik rəqslərinin yaratmış olduğu durğun dalğalar fonon qazı ilə əvəz olunur. Bu isə kristal qəfəsinin bir sıra xassələrini təsvir etməyi asanlaşdırır.

III FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ ELEKTRON VƏ DEŞİKLƏRİN STATİSTİKASI

Yarımkəçiricilərdə baş verən fiziki hadisələr uyğun zonalarda olan sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyasından kəskin sürətdə asılıdır. Odur ki, konsentrasiya yarımkəçiricilərin əsas xassələrini təyin edən parametrlər sırasına daxildir.

Bu bölmədə sərbəst yükdaşıyıcıları (elektron və ya deşiklər) kristal qəfəsin rəqsləri ilə statistik (termodinamik) tarazlıqda olan yarımkəçirici kristallara baxacağıq. Termodinamik tarazlıqda sistemin halı onu bu tarazlığa gətirib çıxaran qarşılıqlı təsirin mexanizmindən asılı olmadığı üçün biz hələlik elektron və deşiklərin kristal qəfəs ilə qarşılıqlı təsirinin mexanizmi ilə maraqlanmayacağıq.

Kristalda olan sərbəst elektronların (və ya deşiklərin) konsentrasiyasını tapmaq üçün E və $E + dE$ enerji intervalına düşən kvant səviyyələrinin sayını və bu səviyyələrdə elektronun (və ya deşiyin) olma ehtimalını (yəni paylanma funksiyasını) bilmək lazımdır. Bir elektronlu yaxınlaşmada elektronların kristalda bir-biri ilə qarşılıqlı təsiri öz-özü ilə əlaqələnen potensialın içərisinə daxil olur. Elektronlar bu potensialın sahəsində bir-birindən asılı olmadan hərəkət edir. Deməli, bir elektronlu yaxınlaşmada kristaldakı elektronlara ideal qaz molekullar kimi baxmaq olar. Təbiidir ki, bu cür qaz spini $\frac{1}{2}$ olan zərrəciklərdən təşkil olunduğu üçün termodinamik tarazlıq halında Fermi-Dirak statistikasına tabe olacaq. Elektron və ya deşiklərin kvant səviyyələrində paylanmasını müfəssəl müzakirə etməzdən əvvəl yükdaşıyıcıların hallara görə paylanma funksiyası, fiziki kəmiyyətlərin orta qiyməti və kvant səviyyələrinin sıxlığı məvhumu ilə tanış olaq.

§ 3.1. Elektronların hallara görə paylanma funksiyası. Fiziki kəmiyyətlərin orta qiyməti

X, Y, Z , koordinatları və P_x, P_y, P_z , impulsları fəzası faza fəzası adlanır.

Faza fəzasında (x, y, z, P_x, P_y, P_z) koordinatlı nöqtələr ətrafında quruluş həcm elementinə baxaq:

$$d\Gamma = dx dy dz dp_x dp_y dp_z = d\tau_r d\tau_p \quad (3.1.1)$$

Aydındır ki, $d\Gamma$ həcm elementi kifayət qədər kiçikdirsə, bu həcmdəki elektronların dN sayı $d\Gamma$ həcmnin ölçüləri ilə mütənəşib olar. Bundan əlavə, bu say faza fəzasında (\vec{r}, \vec{p}) nöqtəsindən asılı olub hər hansı $F(\vec{r}, \vec{p}, t)$ funksiyası ilə təyin olunur.

$$dN = F(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma \quad (3.1.2)$$

Bu ifadəni bütün faza fəzası üzrə inteqrallasaq, elektronların tam N sayını alırıq:

$$N = \int_{(V_r)} F(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma \quad (3.1.3)$$

$F(\vec{r}, \vec{p}, t)$ funksiyası faza fəzasının vahid həcmindəki elektronların sayını müəyyən edir. Onun əvəzinə ondan elektronların N sayı dəfə kiçik $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ funksiyasını daxil edək:

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{N} F(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (3.1.4)$$

Onda, $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ funksiyası bir elektronun vahid faza fəzasında olma ehtimalını verir. Buna əsasən

$$\int_{(V_r)} f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma = 1 \quad (3.1.5)$$

bərabərliyi normalaşma şərti adlanır. İnteqrallama kristalın tam V həcmi və implusun bütün mümkün qiymətləri üzrə aparılır. Normalaşma şərti zamandan asılı deyil, paylanma funksiyası isə ümumi halda zamandan asılıdır. Paylanma funksiyasının köməyi ilə koordinat və implusdan asılı olan ixtiyari fiziki kəmiyyətin orta qiymətini hesablamaq olar. Fərz edək ki, α elektronun hərəkət halından asılı hər hansı kəmiyyətdir: $\alpha = \alpha(\vec{r}, \vec{p}, t)$. Onda $d\Gamma$ faza fəzasında hər biri $\alpha(\vec{r}, \vec{p}, t)$ kəmiyyətinə malik

$$dN = Nf(\vec{r}, \vec{p}, t) dF \quad (3.1.6)$$

sayda elektron yerləşir. dN sayda elektron üçün fiziki kəmiyyətlərin cəm qiyməti

$$\alpha dN = \alpha(\vec{r}, \vec{p}, t) Nf(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma \quad (3.1.7)$$

kimidir. Əgər bu kəmiyyəti bütün faza fəzası üçün inteqrallasaq, bütün elektronlar üçün α kəmiyyətinin cəm qiymətini almış olarıq; bu cəmi elektronların ümumi sayı N –ə bölməklə isə bu kəmiyyətin $\langle \alpha \rangle$ orta qiymətini alırıq:

$$\langle \alpha \rangle = \frac{1}{N} \int_{(V_r)} \alpha dN = \int_{(V_r)} \alpha(\vec{r}, \vec{p}, t) f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\Gamma \quad (3.1.8)$$

Əgər (3.1.7) kəmiyyətini yalnız implusa görə inteqrallayıb, $N d\tau_r$ –ə bölsək, onda elektronların r nöqtəsi ətrafında malik olduqları $\overline{\alpha(\vec{r})^p}$ orta qiymətini almış olarıq.

Praktiki cəhətdən mühüm olan bir halı nəzərdən keçirək. Fərz edək ki, paylanma funksiyası koordinatdan asılı deyil. Onda (3.1.5) münasibətinin koordinatlar üzrə inteqralı cismin V həcmi verir, bunun da nəticəsində paylanma funksiyasının impluslar üzrə inteqralı həcmə tərs qiymətini verməlidir. Əgər α kəmiyyəti də r koordinatlarından asılı deyilsə, onun impuls üzrə ortalaşmış qiyməti $\overline{\alpha^p} = \frac{\langle \alpha \rangle}{V}$ verir ki, burada V cismin həcmidir.

Cərəyanın sıxlığını paylanma funksiyası ilə

$$\vec{j} = en\langle \vec{v} \rangle = enV \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{v} f(\vec{r}, \vec{p}, t) d\tau_p = en\vec{v}_d \quad (3.1.9)$$

kimisi ifadə etmək olar.

Əgər, $f(\vec{r}, \vec{p}, t) = f(\vec{r}, -\vec{p}, t)$, yeni \vec{v} və $-\vec{v}$ sürətləri ilə hərəkətlər eyni ehtimallı olarsa, onda sürətin orta qiyməti $\langle \vec{v} \rangle$, $\frac{\vec{p}}{m} f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ funksiyası tək funksiya olduğundan, simmetrik intervalda inteqrallamada sıfıra bərabər olur.

Termodinamik tarazlıq halında olan metallarda elektronların hərəkəti cüt simmetrik paylanma funksiyası ilə təsvir olunur. Buradan çoxdan məlum olan bir fakt meydana çıxır: istilik hərəkəti cərəyanın yaranmasına gətirib çıxarmır. Cərəyanın meydana çıxması üçün paylanma funksiyasının simmetrikliliyini pozmağa müvafiq lazımi şərait yaradılmalıdır, bu zaman sürətlərin müəyyən istiqamətdə yönəlmə ehtimalı digər istiqamətlərə nəzərən daha üstün olur. Bu elektronlar toplusunun fəzada müəyyən yerdəyişməsinə gətirib çıxarır, xaotik istilik hərəkətinə elektronların istiqamətlənmiş hərəkəti əlavə olunur ki, bu da müxtəlif səbəblərdən; elektrik sahəsi, temperaturu qradienti, qeyri-bərabər işıqlanma və s. nəticəsində baş verə bilər.

Kvant statistikasına görə sistemin tarazlıq halına uyğun paylanma funksiyasının ifadəsi ($f = f_0$)

$$f_0(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{k_0 T}} + 1} \quad (3.1.10)$$

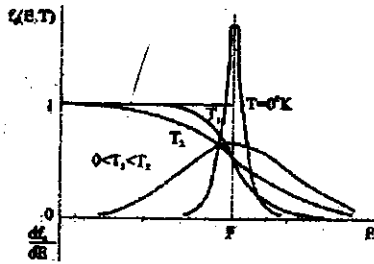
kimidir. Burada E-elektronun verilmiş halını xarakterizə edən tam enerji, T-mütləq temperatur, k_0 - Bolsman sabiti, F-Fermi enerjisi (səviyyəsi)-dir.

$f_0(E, T)$ kəmiyyəti E enerjili səviyyəsinin elektronla tutulma ehtimalıdır. $f(E, T)$ -Fermi-Dirak funksiyası adlanır. Deməli, elektronun E-enejiyə malik səviyyədə alma ehtimalı enejinin E qiyməti və T mütləq temperaturdan asılıdır. Bundan əlavə, (3.1.10) ifadəsindən görüldüyü kimi, bu ehtimal həm də F- Fermi səviyyəsindən asılıdır. Bunun fiziki

mənasının sonrakı sadə hallar üçün aparılacaq mühakimələrdən asanlıqla başa düşmək olar. Fərz edək ki, $T \rightarrow 0$, onda

$$\lim_{T \rightarrow 0} f_0(E, T) = \begin{cases} 1 & E < F, \\ 0 & E > F. \end{cases} \quad (3.1.11)$$

$E=F$ qiymətində funksiya təyin olunmayıb, bundan əlavə, o kəsilməyə məruz qalır. Şəkil 3.1.-də $f_0(E, T)$ funksiyasının qrafiki verilmişdir. Qrafikdən görüldüyü kimi, $T=0$ temperaturda enerjinin $E < F$ şərtini ödəyən qiymətlərdə bütün səviyyələr elektronlarla dolu, $E > F$ -ə uyğun səviyyələr isə tamamilə boşdur.



Şəkil 3.1. Müxtəlif temperaturlarda Fermi-Dirak funksiyası və onun enerjiyə görə törəməsi

Verilmiş halda Fermi səviyyəsinin fiziki mənası çox əyani nəzərə çarpır: Fermi səviyyəsi metallarda mütləq sıfır temperaturda elektronların malik olduqları maksimum enerjidir. Bununla bərabər qeyd etmək olar ki, Fermi səviyyəsi elektronlarla dolmuş səviyyələrə boş səviyyələrdən ayırır.

Ümumi halda Fermi enerjisi bir zərəcəyə düşən Gibbs termodinamik potensialıdır. Bu kəmiyyəti həmçinin kimyəvi potensial da adlandırırlar. Fiziki mənə baxımından Fermi enerjisi F , ədədi qiymətcə, sabit həcm və temperaturda sistemdə

zərəciklərin sayını mmmmbir vahid artırmaq üçün görülən işə bərabərdir. İndi $T \neq 0$ olan hala baxaq. (3.1.10) ifadəsində tempera-turun sıfırdan fərqli istənilən qiyməti üçün $E=F$ olduqda, $f(E=F, T) = \frac{1}{2} = 0,5$ alarıq.

Əgər $E \ll F$ olarsa, $f_0(E, T) \approx 1$, $E \gg F$ olarsa isə (3.1.10) ifadəsində $e^{\frac{E-F}{kT}} \gg 1$ olduğundan, məxrəcdə vahidi eksponential həddə görə nəzərə almasaq, Fermi-Dirak paylanma funksiyası aşağıdakı şəkə düşər;

$$f_0(E, T) \approx e^{-\frac{E-F}{kT}} = e^{\frac{F}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} = A e^{-\frac{E}{kT}} \quad (3.1.12)$$

Deməli, enerjinin Fermi enerjisindən çox-çox böyük qiymətlərində ($E \gg F$) elektron qazı Bolsman statistikasına tabe olur.

$f_0(E, T)$ ehtimalı $E = F - \text{Fermi səviyyəsinin } k_0T$ -nin bir neçə mislinə bərabər yaxın ətrafında güclü dəyişməyə məruz qalır. Həqiqətən də, $E = F + \xi k_0T$ əvəzləməsini etsək, burada ξ Fermi səviyyəsindən hesablanan, kT -nin misilləri ilə enerjini ifadə edən dəyişən kəmiyyətdir:

$$\xi = \frac{E - F}{k_0T} \quad (3.1.13)$$

Bunu nəzərə alsaq (3.1.10) ifadəsindən paylanma funksiyası üçün alırıq:

$$f_0(\xi) = \frac{1}{e^\xi + 1} \quad (3.1.14)$$

Cədvəl 3.1-də ξ -nin bir neçə qiymətinə uyğun $f_0(\xi)$ funksiyasının aldığı qiymətlər verilmişdir.

Cədvəl 3.1

ξ	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
$f_0(\xi)$	0,98	0,954	0,882	0,73	0,50	0,27	0,118	0,048	0,018

Şəkil 3.2-də $f_0(\xi)$ funksiyasının qrafiki verilmişdir. Bu qrafikdən görüldüyü kimi, $-2 \leq \xi \leq 2$ intervalında $0,88 < f_0(\xi) < 0,12$ olur. Başqa sözlə, $f_0(E, T)$ funksiyası enerjini $F - 2k_0T \leq E \leq F + 2k_0T$ intervalındakı qiymətlərində daha kəskin dəyişikliyə məruz qalır, $\xi < -2$ və $\xi > 2$ qiymətlərində $f_0(\xi) \approx 1$ qəbul etmək olar. $f_0(E, T)$ funksiyasının kəskin dəyişməyə məruz qaldığı enerji intervalı temperaturdan asılıdır və $T \rightarrow 0$ -temperatur sıfıra yaxınlaşdıqca, o da sıfıra yaxınlaşır. Paylanma funksiyasının dəyişməsinə xarakterizə etmək üçün onun enerjiyə görə törəməsindən istifadə etmək daha əlverişlidir:

$$\begin{aligned} f'_{0E} &= \frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial E} = -\frac{1}{kT} \frac{e^\xi}{(e^\xi + 1)^2} = -\frac{1}{kT} \frac{e^\xi}{e^{2\xi} + 2e^\xi + 1} = \\ &= -\frac{1}{kT} \frac{1}{e^\xi + 2 + e^{-\xi}} = -\frac{2kT}{1 + \frac{e^\xi + e^{-\xi}}{2}} = -\frac{2kT}{1 + ch\xi}, \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

burada $ch\xi = \frac{e^\xi + e^{-\xi}}{2}$.

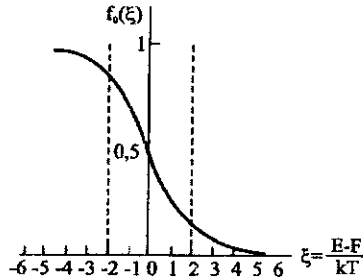
$T \rightarrow 0$ şərtində $E = F$ ($\xi = 0$) -dən başqa hər yerdə $ch\xi \rightarrow \infty$ olur və ona görə də $T \neq 0$ olduqda f'_{0E} yalnız $\xi = 0$ nöqtəsinin yaxın ətrafında sıfırdan

fərqli olur. $T \rightarrow 0$ limitində bu ətraf $\xi=0$ nöqtəsində bir nöqtəyə yığılır, belə ki,

$$-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} = \begin{cases} \infty, & E = F \\ 0, & E \neq F \end{cases} \quad (3.1.16)$$

bu zaman

$$-\int_{-\infty}^{\infty} f_{0E}'(E,0)dE = 1 \quad (3.1.17)$$



Şəkil 3.2. Fermi-Dirak funksiyası. Enerji kT -lə ifadə olunub. Fermi səviyyəsinin hesablanması

Olur və bu şərt temperaturun istənilən $T \geq 0$ qiymətində doğru dur. Buradan $-f_{0E}'(E,0)$ -in Dirak δ -funksiyası olduğu görünür.

$T > 0$ qiymətlərində temperatur kiçildikcə, $f_{0E}'(E,T)$ funksiyası δ -funksiyaya daha yaxın olur. Şəkil 3.1-də $f_{0E}'(E,T)$ funksiyasının müxtəlif temperaturlarda qrafiki verilmişdir.

Fermi-Dirak funksiyası ilə təsvir olunan kvant sistemləri cırılmış adlanırlar.

ξ -nin böyük qiymətləri üçün $e^{\xi} \gg 1$ olduğundan $f_0(\xi)$ eksponensial funksiya şəklində ifadə oluna bilər:

$$f_0(\xi) = \frac{1}{e^{\xi} + 1} \approx e^{-\xi}, \quad (3.1.18)$$

$$f_0(E,T) \approx e^{-\frac{E-F}{kT}} = e^{\frac{F}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}}. \quad (3.1.19)$$

Alınan bu funksiya klassik və ya Bolsman paylanma funksiyası adlanır. Bolsman paylanma funksiyası ilə təsvir olunan və ya klassik statistikaya tabe olan sistem cırılmış adlanır. Klassik paylanma funksiyasının kvant paylanma funksiyasından fərqi yalnız onların analitik ifadəsində deyil, daha dərin mənaya malik olub, xüsusi halda onunla

əlaqədardır ki, klassik fizikada kinetik və potensial enerjilər ayrı-ayrılıqda təyin oluna bildikləri halda, kvant mexanikası baxımından enerji halları tam enerji ilə müəyyən olmadığından, bu mümkün deyil.

Fiziki kəmiyyətlərin orta qiymətlərini $f_0(E, T)$ paylanma funksiyasından istifadə etməklə hesablamaq üçün enerji ilə sürət \vec{v} (və ya impuls \vec{p}) arasındakı asılılığı bilmək vacibdir. Fərz edək ki, məxsusi elektron qazı üçün:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (3.1.20)$$

şərti ödəyir.

Eneji impulsun istiqamətindən asılı olmadığından, faza fəzasında $d\tau_p = dp_x dp_y dp_z$ həcm elementini sferik koordinatlarda ifadə edək:

$$d\tau_p = p^2 dp d\Omega = p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi \quad (3.1.21)$$

Sistemin Bolsman statistikasına tabe olduğunu fərz edərək, elektronun orta enerjisini hesablayaq:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\int E f_0(E, T) d\tau_p}{\int f_0(E, T) d\tau_p} = \frac{\int E \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi d\tau_p}{\int e^{-\frac{E}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} p^2 dp \sin\theta d\theta d\varphi d\tau_p} = \\ &= \frac{e^{-\frac{E}{kT}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\varphi}{e^{-\frac{E}{kT}} \int_V d\tau_p \int_V d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta} = \frac{4\pi V \int_0^\infty \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2 dp}{4\pi V \int_0^\infty \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2 dp} = \frac{\int_0^\infty \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2 dp}{\int_0^\infty e^{-\frac{p^2}{2mkT}} p^2 dp} \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

alırıq. Məxrəcdəki ifadənin mövcudluğu hesablamağa istifadə etdiyimiz Maksvell paylanma funksiyasının normalaşmamasıdır. Yekun dəyişənlərə keçməklə hesablamaları sadələşdirmək olar:

$$\frac{p^2}{2mk_0T} = x; \quad p^2 = (2mk_0T)x; \quad dp = \frac{1}{2}(2mk_0T)^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{x^{\frac{1}{2}}} \quad (3.1.23)$$

(3.1.23)-ü (3.1.22)-də nəzərə alsaq,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\int_0^\infty k_0 T x e^{-x} (2mk_0T)x (2mk_0T)^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{\sqrt{x}}}{\int_0^\infty e^{-x} (2mk_0T)x \frac{1}{2} (2mk_0T)^{\frac{1}{2}} \frac{dx}{\sqrt{x}}} = \frac{\frac{1}{2} (k_0 T) (2mk_0T)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty x^{\frac{3}{2}} e^{-x} dx}{\frac{1}{2} (2mk_0T)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx} = \\ &= \frac{(k_0 T) \int_0^\infty x^{\frac{3}{2}} e^{-x} dx}{\int_0^\infty x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx} = \frac{3}{2} k_0 T. \end{aligned} \quad (3.1.24)$$

Aşağıdakı ifadə

$$\int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (3.1.25)$$

Puasson inteqralıdır. Bundan əlavə, biz Bolsman funksiyası üçün normalaşma əmsalını da tapdıq. Faza fəzası üzrə inteqrallamada vahidə normalaşan Bolsman funksiyası aşağıdakı şəkllə düşür:

$$f_0(E, T) = \frac{1}{V} \left(\frac{1}{2\pi m k_0 T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{p^2}{2mk_0 T}} \quad (3.1.26)$$

İndi eyni şərtlər daxilində cırılmış sistemdəki elektronların orta enerjisini tarıq:

$$f_0(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{p^2}{2m} - F} + 1} \quad (3.1.27)$$

olduğunu nəzərə alsaq,

$$\langle E \rangle = \frac{4\pi V \int_0^{\infty} \frac{p^2}{2m} \frac{1}{e^{\left(\frac{p^2}{2m} - F\right)/k_0 T} + 1} p^3 dp}{e^{\left(\frac{p^2}{2m} - F\right)/k_0 T} + 1} \quad (3.1.28)$$

alarıq.(3.1.23)-dəki kimi yeni dəyişənlərə keçib, sadələşdirmə apardıqdan sonra, enerjinin orta qiyməti üçün

$$\langle E \rangle = k_0 T \frac{e^{\frac{F}{k_0 T}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{3}{2}} dx}{e^{\frac{x}{k_0 T}} + 1}}{e^{\frac{F}{k_0 T}} + 1} \quad (3.1.29)$$

ifadəsini alırıq.

Temperaturun yüksek qiymətlərində $k_0 T \gg F$ olduğundan, $e^{\frac{F}{k_0 T}} \approx 1$ qəbul etmək olar, onda (3.1.29) ifadəsində x -in kiçik qiymətlərində $e^x - 1$ nəzərə alınmasa, kvant statistikasını klassik statistikaya keçir və (3.1.24)-ə uyğun olaraq

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} k_0 T \quad (3.1.30)$$

alıırıq.

Çox aşağı temperaturlarda isə Fermi-Dirak funksiyası düzbucaqlı vahid pilləkənvari şəkildədir və interalı 0-dan $x = \frac{F}{k_0 T}$ -yə qədər intervalda hesablamaq olar:

$$\langle E \rangle = \frac{k_0 T \int_0^{\frac{F}{k_0 T}} x^2 dx}{\int_0^{\frac{F}{k_0 T}} x^2 dx} = \frac{3}{5} F \quad (3.1.31)$$

(3.1.31)-dən göründüyü kimi, cırlaşmış elektron qazının enerjisi temperaturdan asılı deyil, məhz ona görə də o, istilik tutumunda iştirak etmir, bu da bərk cisimlərin istilik tutumları üçün Dyülonq-Pti qanunun fiziki izahını verir.

Əgər daha ciddi hesablar aparsaq,

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} F_0 \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_0 T}{F_0} \right)^2 \right] \quad (3.1.32)$$

alırıq.

Adi temperaturlarda bərk cisimlərin istilik tutumlarında elektronların hərəkətinin izahı kvant nəzəriyyəsinin ən böyük müvəffəqiyyətlərindən biri idi, belə ki, klassik elektron nəzəriyyəsinə görə elektronlar bərk cismin xüsusi istilik tutumuna $\frac{3}{2} k_0 n T$ miqdarda əlavə verməli idilər.

Beləliklə, aşağı temperaturlarda elektronların enerji səviyyələri üzrə paylanması istilik hərəkəti ilə deyil, dalğa xassələri, Pauli prinsipinə görə baş verir, bu temperaturlarda $\langle E \rangle = \frac{3}{5} F$ olub, bir neçə elektronvolt tərtibindədir, ona görə də istilik hərəkəti elektron qazının enerjisinə hiss olunacaq qədər təsir edə bilmir. Amma yüksək temperaturlarda $k_0 T > F_0$ olur və artıq istilik hərəkətinin enerji payını nəzərə almaq lazım gəlir.

Kvant statistikasından klassik statistika keçid

$$k_0 T_c = F_0 \quad (3.1.33)$$

və ya

$$T_c = \frac{F_0}{k_0} \quad (3.1.34)$$

şərti ilə müəyyən oluna bilər.

T_c -temperaturu cırlaşma temperaturu adlanır, belə ki, $T > T_c$ olduqda elektron qazı klassik (cırlaşmamış), $T < T_c$ olduqda isə kvant (cırlaşmış) olur.

Yarımkəçiricilərin xassələrinin təsvirində həm Fermi-Dirak paylanma funksiyasına müvafiq cırlaşmış, həm də Bolsman statistikasına müvafiq cırlaşmamış hallar nəzərdən keçirilir.

§ 3.2. Hal sıxlığı. Kvant hallarının sayı

Tutaq ki, vahid həcmli kristalda enerjinin E və $E + dE$ intervalında spinə görə cırlaşmanı da nəzərə aldıqda dz sayda kvant səviyyəsi vardır. Vahid həcmli kristalda vahid enerji intervalına düşən kvant səviyyələrinin sayına **hal sıxlığı** desək, onda:

$$N(E) = \frac{dz}{dE}. \quad (3.2.1)$$

İstənilən T temperaturunda baxdığımız intervalda hər hansı kvant səviyyəsinin elektron tərəfindən tutulma ehtimalı $f_0(E, T)$ məlum olsa, onda dE intervalındakı elektronların sayı:

$$dn = f_0(E, T) dz = f_0(E, T) N(E) dE. \quad (3.2.2)$$

Verilmiş zonadakı elektronların tam sayını tapmaq üçün (3.2.2) ifadəsini enerjinin mümkün qiymətləri üzrə inteqrallamaq lazımdır:

$$n = \int_{E_1}^{E_2} f_0(E, T) N(E) dE, \quad (3.2.3)$$

burada E_1 - zonda enerjinin ən kiçik (minimum), E_2 isə ən böyük (maksimum) qiymətidir. (3.2.3) ifadəsi vahid həcmli kristal üçün götürüldüyünə görə o elə elektronun konsentrasiyasını verir.

Ən sadə hal üçün keçiricilik zonasında hal sıxlığını tapaq. Tutaq ki, keçiricilik zonasında enerjinin yalnız bir minimumu var və bu minimumun yaxın ətrafında enerji aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{8\pi^2 m_*^*} = E_c + \frac{p^2}{2m_*^*}. \quad (3.2.4)$$

Aydın ki, bu halda effektiv kütlə skalyar kəmiyyətdir, izoenergetik səthlər isə sfera şəklindədir. $E(\vec{p}) = \text{const}$ və $E(\vec{p} + d\vec{p}) = E(\vec{p}) + dE = \text{const}$ iki izoenergetik səth arasında qalan küre təbəqəsinə baxaq (şəkil 3.3). Bu təbəqənin həcmi:

$$dV = 4\pi p^2 dp. \quad (3.2.5)$$

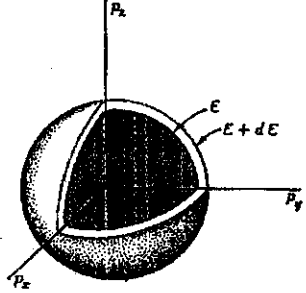
Bu dV həcmində kvant səviyyələrinin sayını bilmək üçün onu Brillyüen zonasında (impuls fəzasında) bir səviyyəyə uyğun gələn həcmə bölmək kifayətdir. Göstərmək olar ki, bu həcm \hbar^3 -na bərabərdir. Bunu sadə kubik kristal qəfəs üçün sübut edək. Bu halda Brillyüen zonası kub şəklindədir və dalğa vektoru fəzasında $\left(k, \pm \frac{\pi}{a}, i = 1, 2, 3\right)$ onun həcmi:

$$V_0 = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

kimidir. $p_i = \frac{1}{2\pi}hk$ olduğu üçün impuls fəzasında Brilliyen zonasının həcmi:

$$V_0 = \left(\frac{2\pi\hbar}{a} \right)^3 = \frac{\hbar^3}{a^3} = \frac{\hbar^3 N}{a^3 N} = \frac{\hbar^3 N}{V}, \quad (3.2.6)$$

burada a^3 -düz kristal qəfəsində elementar özəyin həcmi, N -kristalda olan atomların sayı, $V = a^3 N$ - kristalın həcmidir (sadə kubik kristalda hər elementar özəyə bir atom düşdüyü üçün kristalın həcmi bir elementar özəyin həcmindən kristaldakı atomların sayına bərabərdir).



Şəkil 3.3.

$E(\vec{p}) = \text{const}$ və $E(\vec{p} + d\vec{p}) = E + dE = \text{const}$ enerji intervalları arasındakı kvant hallarının sayı qalınlığı dE olan sferik qatdakı halların sayına bərabərdir

Hər bir zonada N səviyyə (spinə görə cırlaşmanı nəzərə almadan) olduğu üçün, (3.2.6) ifadəsindən göründüyü kimi, vahid həcmli ($V = 1 \text{ sm}^3$) kristal üçün $\frac{V_0}{N} = \hbar^3$ -dur, yəni Brilliyen zonasında hər bir enerji səviyyəsinə (spin cırlaşması nəzərə alınmadan) \hbar^3 -na bərabər həcm uyğun gəlir.

Burada biz yalnız spin cırlaşmasının adını çəkdik. Çünki kristal əmələ gələrkən başqa cür cırlaşmaların hamısı aradan qalxır və yalnız spin cırlaşması qalır. Onda spini də nəzərə alsaq, baxdığımız (3.2.5) küre təbəqəsi həcmində olan səviyyələrin sayı:

$$dz = 2 \cdot \frac{dV}{h^3} = \frac{8\pi}{h^3} p^2 dp. \quad (3.2.7)$$

p və dp -ni E vasitəsilə ifadə etmək üçün (3.2.4) münasibətindən istifadə edək:

$$p = (2m_a^*)^{1/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (3.2.8)$$

və

$$dp = \frac{1}{2} (2m_n^*)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{-\frac{1}{2}} dE. \quad (3.2.9)$$

Hal sıxlığının tərifinə görə:

$$N(E) = \frac{dz}{dE} = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.10)$$

Beləliklə, Brillyüen zonasında yalnız bir enerji minimumu və izoenergetik səthlər sferik şəkildə olan hal üçün biz keçiricilik zonasında hal sıxlığını hesabladıq. Eyni qayda ilə valent zonası üçün də hal sıxlığını hesablaya bilərik. Maksimumun yaxın ətrafında enerjinin ifadəsinin

$$E = E_v - \frac{p^2}{2m_p^*} \quad (3.2.11)$$

olduğunu nəzərə alsaq, hal sıxlığı üçün alarıq:

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.12)$$

İndə də izoenergetik səthlər ellipsoid olan hala baxaq. Tutaq ki, keçiricilik zonasında enerjinin bir minimumu var (Brillyüen zonasının mərkəzində) və onun yaxın ətrafında enerji belə bir qanunla dəyişir:

$$E = E_c + \frac{p_x^2}{2m_1} + \frac{p_y^2}{2m_2} + \frac{p_z^2}{2m_3}, \quad (3.2.13)$$

Burada m_i - effektiv kütlə «tenzorunun» diaqonal elementləridir. (3.2.13) tənliyini kanonik şəkə gətirək:

$$\frac{p_x^2}{a_1^2} + \frac{p_y^2}{a_2^2} + \frac{p_z^2}{a_3^2} = 1. \quad (3.2.14)$$

a_1, a_2, a_3 - ellipsoidin yarıoxları belə təyin olunur:

$$a_i = [2m(E - E_c)]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.15)$$

Ellipsoidin həcmi:

$$V = \frac{4\pi}{3} a_1 a_2 a_3 = \frac{8\pi}{3} (2m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{3}{2}}. \quad (3.2.16)$$

$E = const$ və $E + dE = const$ iki izoenergetik səth arasında qalan elementar həcmi tapmaq üçün həcmnin enerjiyə görə diferensialını tapmaq kifayətdir:

$$dV = 4\pi (2m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE. \quad (3.2.17)$$

Kvant səviyyələrinin sayını (spini də nəzərə almaqla) tapmaq:

$$dz = 2 \frac{dV}{h^3} = 4\pi \left(\frac{2}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE. \quad (3.2.18)$$

Hal sıxlığı isə:

$$N(E) = \frac{dz}{dE} = 4\pi \left(\frac{2}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.19)$$

(3.2.19) ifadəsindən görünür ki, əgər

$$m_1 m_2 m_3 = m_{\text{eff}}^3 \quad (3.2.20)$$

əvəz etməsi aparsaq, onda (3.2.19) (3.2.10)-la oxşar olan şəkllə düşər:

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m_{\text{eff}}}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.2.21)$$

burada m_{eff} kəmiyyətinə hal sıxlığına görə hesablanmış effektiv kütlə deyilir. Əslində (3.2.20) əvəzləməsi ellipsoidal izoenergetik səthləri m_{eff} skalyar effektiv kütlə ilə xarakterizə olunan sferik səthlərə gətirmiş olur.

Çox minimumlu yarımqeçiriciyə baxırıqsa, onda ümumi halda Brilliyen zonasında ekvivalent nöqtələrdə yerləşən M minimumun hər birinin yaxın ətrafında izoenergetik səthlər ellipsoid şəklində (3.2.13) olacaq. İndi (3.2.16)-(3.2.18) hesablamalarında minimumların sayının M olduğunu nəzərə alsaq, hal sıxlığı üçün alarıq:

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} M (m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.22)$$

Burada hal sıxlığına görə hesablanmış effektiv kütləni:

$$m_{\text{eff}}^3 = M (m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{2}}$$

yaxud

$$m_{\text{eff}}^* = (M^2 m_1 m_2 m_3)^{\frac{1}{3}} \quad (3.2.23)$$

götürsək, onda hal sıxlığı üçün yenə də (3.2.21)-lə üst-üstə düşən ifadə almış olarıq. m_1 -lərin və M -in qiymətlərini silisium üçün (3.2.23) –də yerinə yazsaq:

$$m_{\text{eff}}^* = (6^2 \cdot 0,19^2 m_0^2 \cdot 0,98 m_0)^{\frac{1}{3}} = 1,08 m_0, \quad (3.2.24)$$

eyni qayda ilə germanium üçün alarıq:

$$m_{\text{eff}}^* = (4^2 \cdot 0,082^2 m_0^2 \cdot 15,8 m_0)^{\frac{1}{3}} = 0,56 m_0. \quad (3.2.25)$$

Valent zonası üçün də izoenergetik səthlər ellipsoid şəklində olduqda hal sıxlığı eyni qayda ilə hesablanır.

Silisium və germanium üçün valent zonasının maksimumunda hal sıxlığını hesablayarkən nəzərə almaq lazımdır ki, $\vec{k} = 0$ ($\vec{p} = 0$) nöqtəsində valent zonası ikiqat cırlaşmışdır. Burada hal sıxlığı yüngül və ağırdeşiklərə uyğun gələn zonaların ayrı-ayrılıqda hesablanmış hal sıxlıqlarının cəminə bərabər olacaq:

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left(m_{1p}^{*2} + m_{2p}^{*2} \right) (E_V - E)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.26)$$

İndi hal sıxlığı üçün (3.2.12) düsturuna oxşar ifadə almaqdan ötrüdeşiklərin hal sıxlığına görə hesablanmış effektiv kütləsini belə götürmək lazımdır:

$$m_{\Phi}^* = \left(m_{1p}^{*2} + m_{2p}^{*2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2.27)$$

Silisium üçün $m_{\Phi}^* = 0,59m_0$, germanium üçün isə $m_{\Phi}^* = 0,37m_0$ -dir.

§ 3.3. Elektron vədeşiklərin konsentrasiyası

Yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, verilmiş zonada sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını təyin etmək üçün, hal sıxlığından başqa, həm də $f_0(E)$ - paylanma funksiyasını bilmək lazımdır. $f_0(E)$ enerjisi E olan səviyyənin elektron tərəfindən tutulma ehtimalını göstərir. Spini $\frac{1}{2}$ -in tək misillərinə bərabər olan eyni cür zərrəciklərdən təşkil olunmuş (belə zərrəciklər Pauli prinsipinə tabe olur) sistemin termodinamik tarazlıq halında zərrəciklərinin paylanması Fermi - Dirak statistikasına tabedir. Onda kristal qəfəsində elektron qazı üçün

$$f_0(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} - 1}, \quad (3.3.1)$$

münasibəti ödənilir.

İndi artıq hal sıxlığı və paylanma funksiyası məlum olduğu üçün hər hansı zonada yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını hesablaya bilərik. Spini də nəzərə alsaq elektronların konsentrasiyası

$$n = 2 \int_{E_1}^{E_2} f_0(E, T) N(E) dE, \quad (3.3.2)$$

kimi hesablanabilir. Burada E_1 və E_2 verilmiş zonanın aşağı və yuxarı sərhəddinə uyğun gələn enerjidir. Biz keçiricilik zonasında elektronun konsentrasiyasını hesablamaq istəyiriksə, onda integralin aşağı sərhədini keçiricilik zonasının dibindən: $E_1 = E_c = E_{\min}$, yuxarı sərhədini isə $E_2 = E_{\max}$ götürmək lazımdır. Hesablamanı asanlaşdırmaq üçün $E_1 = E_c = 0$ seçə bilərik. f paylanma funksiyasının enerjiden kəskin asılılığını nəzərə alsaq, yuxarı sərhədi $E_2 = \infty$ götürə bilərik (enerjinin böyük qiymətləri üçün $f_0 \rightarrow 0$ -dır). Onda (3.2.12) və (3.2.23) ifadələrindən istifadə edib, (3.3.2)-ni aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$n = \int_0^{\infty} \frac{4\pi \left(\frac{2m_{\text{eff}}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE}{e^{\frac{E-F}{k_0 T}} + 1}. \quad (3.3.3)$$

Belə əvəzləmə apararaq:

$$\frac{E}{k_0 T} = x; \quad \frac{F}{k_0 T} = \eta. \quad (3.3.4)$$

Aydındır ki, x və η - adsız ədədlərdir. x -ə gətirilmiş enerji, η -ya gətirilmiş Fermi səviyyəsi və ya gətirilmiş kimyəvi potensial deyilir. (3.3.4)-i (3.3.3)-də yerinə yazaraq:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot 2 \left(\frac{2\pi m_{\text{eff}}^* k_0 T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^{x-\eta} + 1}. \quad (3.3.5)$$

Burada:

$$\begin{aligned} N_c &= 2 \left(\frac{2\pi m_{\text{eff}}^* k_0 T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 4,8 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{\text{eff}}^*}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} T^{\frac{3}{2}} = \\ &= 2,5 \cdot 10^{19} \left(\frac{m_{\text{eff}}^*}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{3}{2}} (\text{sm}^{-3}), \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

N_c - keçiricilik zonasında effektiv hal sıxlığı adlanır. (3.3.6)-dakı inteqralı belə əvəz edək:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^{x-\eta} + 1}. \quad (3.3.7)$$

Bu ifadəyə $\frac{1}{2}$ tərtibli Fermi inteqralı deyilir.

Yeni işarələmələrdə elektronların konsentrasiyası

$$n = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}(\eta) \quad (3.3.8)$$

kimidir. Buradan görünür ki, elektronların konsentrasiyası temperatur və Fermi səviyyəsinin funksiyasıdır: $n = n(T, F)$.

Deşiklər üçün paylanma funksiyasını çox asanlıqla ala bilərik. Hər hansı enerji səviyyəsi elektronla tutulmuşdursa, onda elektronun o səviyyədə olma ehtimalı 1-dir. Elektronun bu səviyyədə olmaması ehtimalı, yəni bu səviyyədə deşiyin olma ehtimalı, belə təyin olunacaqdır:

$$f_{0p}(E, T) = 1 - f_0(E, T) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E-F}{k_0 T}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{F-E}{k_0 T}} + 1}. \quad (3.3.9)$$

Doğrudan da hər hansı bir səviyyədə elektronun və ya dəşiyin olması bir-birini inkar edən hadisələrdir. Ona görə də bu hadisələrdən heç olmasa birinin baş verməsi labüd hadisə olduğu üçün:

$$f_{on} + f_{op} = 1.$$

Bu halda dE enerji intervalında dəşiklərin dp sayı $2N(E)dE$ hallar sayının, bu halların dəşiklərlə tutulma ehtimalı - f_{op} , hasilinə bərabər olar:

$$dp = 2N(E)f_{op}(E,T)dE \quad (3.3.10)$$

Valent zonasında dəşiklərin konsentrasiyasını hesablayaq:

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} f_{op}(E)N(E)dE = \int_{-\infty}^{E_V} 4\pi \left(\frac{2m_{dp}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{(E_V - E)^{\frac{1}{2}} dE}{e^{\frac{F-E}{k_0T}} + 1} \quad (3.3.11)$$

Burada dəşiklər üçün enerjinin hesablanması elektronların enerjisinin hesablandığı istiqamətdə gedir; m_{dp}^* - dəşiklərin valent zonasının hal sıxlığı üçün hesablanmış effektiv kütləsidir; inteqrallama isə $-\infty$ -dan valent zonasının maksimumuna (E_V) qədər aparılır. Belə əvəzləmələr daxil edək:

$$\frac{E_V - E}{k_0T} = x, \quad dE = -k_0T dx, \quad \frac{E_V - F}{k_0T} = \eta \quad (3.3.12)$$

Onda (3.3.11)-dən p -ni Fermi inteqralı vasitəsilə ifadə etmək olar:

$$p = 2\pi \cdot 2 \left(\frac{2m_{dp}^* k_0T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}} dx}{e^{x-\eta} + 1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot N_V F_{\frac{1}{2}}(\eta). \quad (3.3.13)$$

Buradan görünür ki, dəşiklərin konsentrasiyası da temperatur və Fermi səviyyəsinin funksiyasıdır: $p = p(T, F)$.

Son ifadədə

$$N_V = 2 \left(\frac{2m_{dp}^* k_0T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 4,8 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{dp}^*}{m_0} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot T^{\frac{3}{2}} \quad (3.3.14)$$

valent zonasında halların effektiv sıxlığıdır.

Elektronların konsentrasiyasını hesablayarkən yürütdüyümüz mühakimələr valent zonasında dəşiklərin konsentrasiyasını hesablayarkən də öz qüvvəsində qalır. Odur ki, biz hesablamamızın təfsilatına varmadan, qısaca olaraq ayrı-ayrı hallar üçün valent zonasında dəşiklərin konsentrasiyasının ifadəsini verəcəyik.

$F_{\frac{1}{2}}$ - Fermi inteqralını ümumi halda elementar funksiyalar vasitəsilə

ifadə etmək mümkün deyil. Ancaq təcrübəli cəhətdən əhəmiyyətli olan bir sıra xüsusi hallarda arqumentin müəyyən intervaldakı qiymətləri üçün $F_{\frac{1}{2}}$ -i analitik şəkildə ifadə etmək mümkündür.

Müxtəlif oblastlar üçün Fermi inteqralı

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\eta}, & -\infty < \eta < -1 \text{ olduqda,} \\ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{1}{0,25 + e^{-\eta}}, & -1 < \eta < 5 \text{ olduqda,} \\ \frac{2}{3} \eta^{\frac{3}{2}}, & 5 < \eta < \infty \text{ olduqda.} \end{cases} \quad (3.3.15)$$

kimidir. Konsentrasiyanın ifadəsini hər bir xüsusi hal üçün təhlil edək.

1. Cırışmamış elektron qazı. Yarımkəçiricidə elektron qazı o vaxt cırışmamış olur ki, $e^{\eta} \ll 1$ şərti ödənilsin. Bu isə əslində bütün $-\infty < \eta < -1$ intervalını əhatə edir. Bu intervalın yuxarı sərhəddinə baxaq:

$\eta < -1$ və ya $\frac{F}{k_0 T} < -1$, yəni $F < -k_0 T$. Deməli, elektron keçiriciliyinə

malik olan cırışmamış yarımkəçiricidə Fermi səviyyəsi keçiricilik zonasının dibindən (minimumundan) heç olmasa $k_0 T$ qədər aşağıda (qadağan olunmuş zonada) yerləşir. Bu halda keçiricilik zonasında yerləşən elektronlar üçün (belə elektronların enerjisi müsbətdir: $F > 0$ və ya $x > 0$) paylanma funksiyasının məxrəcində eksponensial hədd 1-dən çox-çox böyük olacaq. Onda:

$$f_0 = \frac{1}{e^{x-\eta} + 1} \cong e^{-x+\eta} = e^{\eta} e^{-x} = A e^{-\frac{F}{k_0 T}}. \quad (3.3.16)$$

Buradan görünür ki, cırışmamış yarımkəçiricidə elektron qazı Bolsman statistikasına tabedir.

(3.3.16)-ni (3.3.7)-də nəzərə alsaq:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = e^{\eta} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{1}{2}} dx = e^{\eta} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{\eta}, \quad (3.3.18)$$

alırıq, burada Γ - Eylerin qamma funksiyasıdır, özü də:

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Beləliklə, n tipli keçiriciliyə malik olan cırışmamış yarımkəçiricidə elektronların konsentrasiyası üçün belə bir düstur almış oluruq:

$$n = N_c e^{\eta} = 2 \left(\frac{2\pi m_{\text{eff}}^* k_0 T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{F}{k_0 T}} \quad (3.3.19)$$

Buradan görünür ki, $e^{\eta} \ll 1$ şərtini başqa cür də yazmaq olar:

$$e^{\eta} = \frac{n}{N_c} \ll 1 \text{ və ya } \frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m_{\text{eff}}^* k_0 T} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot n \ll 1. \quad (3.3.20)$$

(3.3.20) şərtindən görünür ki, yarımkəçiricidə cırlaşmanın olmaması üçün kiçik konsentrasiya, böyük effektiv kütlə (hal sıxlığına görə hesablanmış) və yüksək temperatur tələb olunur.

2. Tam cırlaşmış elektron qazı. Aşağıdakı şərt ödənildikdə yarımkəçirici tam cırlaşmış hesab olunur:

$$e^{\eta} \gg 1. \quad (3.3.21)$$

(3.3.21) şərti praktiki olaraq bütün $5 < \eta < \infty$ intervalını əhatə edir. Burada $\eta > 5$ ($F > 5k_0T$) onu göstərir ki, Fermi səviyyəsi keçiricilik zonasında yerləşir, özü də zonanın dibindən ($E_c = 0$) heç olmasa $5k_0T$ qədər yuxarıdadır. Göstərmək olar ki, bu halda yükdaşıyıcıların konsentrasiyası sıfırca yaxınlaşmada temperaturdan asılı deyil.

Paylanma funksiyasının ifadəsindən görünür ki, bu halda $E \ll F$ olduqda $f_0 \sim 1$, $E \gg F$ olduqda $f_0 \approx 0$, yəni $E = F$ -in yaxın ətrafında ($F - k_0T \leq E \leq F + k_0T$) f_0 vahid ilə sıfır arasında kəskin dəyişir (şəkil3.1).

Temperatur aşağı olduqca $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)$ funksiyası da δ -funksiyaya daha yaxın olur. Doğrudan da $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)$ funksiyası yalnız $E = F$ -in yaxın ətrafında sıfırdan fərqlidir və inteqralı

$$\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE = f_0(0) - f_0(\infty) = 1 - 0 = 1 \quad (3.3.22)$$

vahidə bərabərdir. Ona görə də yaza bilərik:

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} \sim \delta(E - F_0), \quad (3.3.23)$$

burada F_0 temperatur $T = 0$ olduqda Fermi səviyyəsini göstərir. (3.3.23) təqribi bərabərliyindən istifadə edib f_0 -ın E -dən asılı olan istənilən

(ixtiyari) $\chi(E) = \frac{d\varphi(E)}{dE}$ funksiyasına hasilinin inteqralını hesablamaq olar.

Bunu aşağıda göstərək:

$$\begin{aligned} J &= \int_0^{\infty} \chi(E) f_0(E, T) dE = \int_0^{\infty} f_0 d\varphi = f_0 \varphi \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \varphi(E) \frac{\partial f_0}{\partial E} dE = \\ &= -\varphi(0) + \int_0^{\infty} \varphi(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) dE \sim -\varphi(0) + \int_0^{\infty} \varphi(E) \delta(E - F_0) dE = -\varphi(0) + \varphi(F_0). \end{aligned}$$

(3.3.24)

Aydınır ki, indi (3.3.7) Fermi inteqralını hesablaya bilərik:

$$F_1(\eta) = \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^{x-\eta} + 1} dx = \int_0^{\infty} \left(\frac{E}{k_0T}\right)^{\frac{1}{2}} f_0 \frac{dE}{k_0T} = \frac{2}{3} \frac{1}{(k_0T)^{\frac{3}{2}}} E^{\frac{3}{2}} \cdot f_0 \Big|_0^{\infty} +$$

$$+ \frac{1}{(k_0 T)^{3/2}} \cdot \frac{2}{3} \int_0^\infty E^{3/2} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE \approx 0 + \frac{2}{3(k_0 T)^2} F_0^3 = \frac{2}{3} \left(\frac{F_0}{k_0 T} \right)^3 = \frac{2}{3} \eta_0^3. \quad (3.3.25)$$

Konsentrasiyanın qiyməti üçün işə alarıq:

$$n = N_c \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{2}{3} \eta_0^3 = 2 \left(\frac{2m_{dn}^* k_0 T}{h^2} \right)^{3/2} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{F_0}{k_0 T} \right)^3 = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_{dn}^*}{h^2} \right)^{3/2} F_0^3. \quad (3.3.26)$$

Buradan:

$$F_0 = \frac{h^2}{2m_{dn}^*} \cdot \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (3.3.27)$$

İndi (3.3.21) tam cırılşma şərtini başqa şəkildə yazsa bilərik:

$$e^{\eta_0} \gg 1, \text{ buradan } \eta_0 \gg 1, \text{ yaxud } \frac{F_0}{k_0 T} \gg 1.$$

(3.3.27)-dən istifadə etsək:

$$\frac{F_0}{k_0 T} = \frac{h^2}{2m_{dn}^*} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} \cdot \frac{1}{k_0 T} \gg 1. \quad (3.3.28)$$

(3.3.28) bərabərsizliyi göstərir ki, yarımqeçiricinin cırılşması üçün yüksək konsentrasiya, kiçik effektiv kütlə (hal sıxlığına görə hesablanmış) və aşağı temperaturlar tələb olunur.

Asanlıqla göstərmək olar ki, metallarda elektron qazı otaq temperaturunda çox güclü cırılşma halındadır. Doğrudan da nəzərə alsaq ki, tipik metallarda $n \sim 10^{22} \text{ sm}^{-3}$, $m \sim 10^{-27} q$, onda $T = 300K$ olduqda (3.3.28)-dən alarıq:

$$\frac{F_0}{k_0 T} \sim 10^2 \gg 1,$$

yəni elektron qazının cırılşması çox güclüdür. Qeyd edək ki, metallarda bu cırılşma ərimə temperaturuna qədər belə davam edir.

Fermi inteqralını daha dəqiq hesablamaq üçün (3.3.24)-dəki $\varphi(E)$ funksiyasını $(E - F_0)$ -in üstünə görə F_0 -in ətrafında sıraya ayırmaq lazımdır. Belə etsək, birinci yaxınlaşmada Fermi səviyyəsi üçün alarıq:

$$F = F_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_0 T}{F_0} \right)^2 \right]. \quad (3.3.29)$$

3. Aralıq interval ($-1 < \xi < 5$). Bu interval cırılşmamış elektron qazı halından tam cırılşmaya keçid oblastını əhatə edir. Göstərmək olar ki, bu intervalda elektronların konsentrasiyasını kiçik bir xəta ilə belə bir düsturla ifadə etmək olar:

$$n = N_c \frac{1}{0,25 + e^{-\frac{F}{k_0 T}}} \quad (3.3.30)$$

1. Cırışmamış deşik qazı. Cırışmamış şərti: $e^\eta \ll 1$, yəni $e^{\frac{E_V - F}{k_0 T}} \ll 1$, praktiki olaraq $-\infty < \eta < -1$ intervalını əhatə edir. Bu intervalın yuxarı sərhədi: $\eta < -1$, yaxud $\frac{E_V - F}{k_0 T} < -1$, buradan $F > E_V + k_0 T$, yəni cırışmamış deşik keçiriciliyinə malik olan yarımkəçiricidə Fermi səviyyəsi valent zonasının maksimumundan (təpəsindən) heç olmasa $k_0 T$ qədər yuxarıda (qadağan olunmuş zonada) yerləşir. Bu halda deşiklərin konsentrasiyası belə təyin olunur:

$$p = N_V e^\eta = N_V e^{\frac{E_V - F}{k_0 T}} = N_V e^{-\frac{\Delta E_g - F}{k_0 T}} = N_V e^{-\frac{\Delta E_g + F}{k_0 T}} \quad (3.3.31)$$

Burada nəzərə alınmışdır ki, $E_c = 0$, yəni $E_V = -\Delta E_g$ -dir.

2. Tam cırışmış deşik qazı. Tam cırışma şərti $e^\eta \ll 1$ praktiki olaraq $5 < \eta < \infty$ intervalını əhatə edir. Bu intervalın aşağı sərhəddindən: $\eta > 5$, yaxud $\frac{E_V - F}{k_0 T} > 5$ görünür ki, $F < E_V - 5k_0 T$ -dir, yəni deşik keçiriciliyinə malik olan tam cırışmış yarımkəçiricidə Fermi səviyyəsi valent zonasında, onun maksimumundan heç olmasa $5k_0 T$ qədər aşağıda yerləşir. Bu hal üçün sıfırıncı yaxınlaşmada deşiklərin konsentrasiyası aşağıdakı düsturla ifadə olunur:

$$p = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_{dp}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_V - F)^{\frac{3}{2}} = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_{dp}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (-E_g - F)^{\frac{3}{2}} \quad (3.3.32)$$

3. Aralıq intervalı ($-1 < \eta < 5$) üçün deşiklərin konsentrasiyasını kiçik bir xəta ilə belə ifadə etmək olar:

$$p = N_V \frac{1}{0,25 + e^{\frac{\Delta E_g + F}{k_0 T}}} \quad (3.3.33)$$

Nəhayət, qeyd edək ki, cırışmamış yarımkəçiricidə elektronlarla deşiklərin konsentrasiyasının hasilı sadə bir ifadə verir:

$$np = N_c e^{\frac{F}{k_0 T}} \cdot N_V e^{-\frac{\Delta E_g + F}{k_0 T}} = N_c N_V e^{-\frac{\Delta E_g}{k_0 T}}, \quad (3.3.34)$$

yəni bu hasil Fermi səviyyəsindən asılı deyil.

§3.4. Elektroneytrallıq tənliyi. Fermi səviyyəsinin temperaturdan asılılığı

Yuxarıda biz elektron və deşiklərin konsentrasiyasını Fermi səviyyəsi vasitəsilə ifadə etdik. Əgər F məlum olsa, onda asanlıqla deşiyin və elektronun konsentrasiyasını hesablamaq mümkündür. Lakin Fermi səviyyəsi yarımkeçiricinin aşqarlanma dərəcəsiindən və temperaturdan kəskin surətdə asılıdır. Doğrudan da yarımkeçiricidə kənar aşqar olduqda qadağan olunmuş zonada lokal aşqar səviyyələri yaranır. Bu səviyyələri həm elektronlar, həm də deşiklər tuta bilərlər. Yükdəşıyicilərin enerji səviyyələri üzrə təzədən paylanması isə Fermi səviyyəsinin dəyişməsi hesabına tənzim olunur.

Adətən Fermi səviyyəsinin vəziyyətini təyin etmək üçün kristalın elektrik yükü baxımından neytral olması şərtindən və bu şərti ifadə edən tənlikdən istifadə edirlər. Bu tənliyi almaq üçün kristalda olan mənfi yüklərin cəmini müsbət yüklərin cəminə bərabər götürmək lazımdır. Tutaq ki, yarımkeçiricidə həm donor, həm də akseptor tipli aşqarlar vardır və bunların konsentrasiyaları uyğun olaraq N_d və N_a -dir. Tarazlıq halında termik ionlaşma nəticəsində həm aşqar mərkəzlərindən və həm də əsas atomlardan (valent zonasından) keçiricilik zonasına müəyyən miqdarda elektron keçir. Vahid həcmli kristal üçün elektrik yükünün neytrallığı şərtini yazaq. Bunun üçün ayrı-ayrılıqda mənfi və müsbət yüklərin miqdarını hesablayaq (şəkil 3.4). Mənfi yüklər keçiricilik zonasındaki elektronlar və elektronu zəbt etmiş akseptor mərkəzləridir (belə mərkəzlərin konsentrasiyasını N_a^- ilə işarə edək). Onların cəmi:

$$(n + N_a^-)e^-.$$

Müsbət yüklər valent zonasındaki sərbəst deşiklər və elektronunu itirmiş donor mərkəzləridir (belə mərkəzlərin konsentrasiyasını N_d^+ ilə işarə edək). Müsbət yüklərin cəmi:

$$(p + N_d^+)e^+.$$

burada e^- və e^+ uyğun olaraq elektronun və deşiyin yükünü göstərir ($e^- = -e^+$). İndi elektrik yükünün neytrallıq şərtini yazaq:

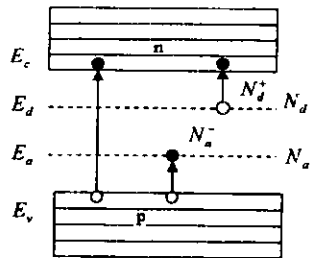
$$(n + N_a^-)e^- + (p + N_d^+)e^+ = 0 \quad (3.4.1)$$

yaxud

$$(n + N_a^-) + (p + N_d^+) = 0. \quad (3.4.2)$$

Buna kristalın elektrik yükünün neytrallığı tənliyi və ya elektroneytrallıq tənliyi deyilir. Burada N_d^+ və N_a^- hələlik bizə məlum deyil. Onları tapmaq üçün elektronun lokal səviyyələrində paylanma qanununu bilmək lazımdır. Elektronların lokal aşqar səviyyələrində

paylanması Fermi-Dirak paylanma funksiyası ilə təsvir edilə bilməz. Çünki bu paylanma o vaxt doğrudur ki, hər hansı bir enerji səviyyəsində spinləri bir-birinin əksinə yönəlmiş iki elektron eyni zamanda ola bilsin, lakin, məsələn, E_d donor səviyyəsində təkcə bir elektron ola bilər. Doğrudan da, əgər həmin səviyyəyə ikinci bir elektron «oturtmuş» olsaq, elektronların kulon qarşılıqlı təsiri (itələməsi) nəticəsində sistemin (donor mərkəzi plus iki elektrondan ibarət olan sistemin) enerjisi dəyişəcək və bu hala uyğun gələn enerji səviyyəsi E_d -dən fərqlənəcək (daha doğrusu sistemin enerjisi o qədər artacaq ki, artıq o dayanıqsız olacaq).



Zərrəciklərinin sayı dəyişə bilən Şəkil 3.4. Donor və akseptor sistemlər üçün Gibbs metodu ilə aparılan tipli aşqara malik yarımkəçicilərdə yükdaşıyıcıların hesablamalar göstərir ki, enerjisi E_i olan aşqar səviyyəsində elektronun halını istilik generasiyası xarakterizə edən paylanma funksiyası belədir:

$$f_n = \frac{1}{g_0 e^{\frac{E_i - F}{kT}} + 1}, \quad (3.4.3)$$

burada g_0 - elektron tərəfindən tutulmamış enerji səviyyəsinin cırılma dərəcəsi (statistik çəkisi), g_1 - elektron tərəfindən tutulmuş səviyyənin cırılma dərəcəsidir. Elektronu olmayan mərkəzi adətən cırılmamış hesab etmək olar, onda $g_0 = 1$. g_1 cırılması spinlə əlaqədardırsa, onda $g_1 = 2$ olar. Belə olduqda, enerjisi E_d olan hər hansı aşqar (donor) səviyyəsinin elektron tərəfindən tutulması ehtimalı:

$$f_n = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - F}{kT}} + 1}. \quad (3.4.5)$$

İndi N_d^* -ni tapa bilərik:

$$N_d^* = N_d - f_n N_d = N_d - \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - F}{kT}} + 1}. \quad (3.4.6)$$

Eyni qayda ilə, E_a akseptor mərkəzinin dəşik tərəfindən tutulması ehtimalı:

$$f_p = \frac{1}{\frac{1}{2}e^{\frac{F-E_p}{k_0T}} + 1} \quad (3.4.7)$$

Deməli:

$$N_a^- = N_a - f_p N_a = N_a - \frac{N_a}{\frac{1}{2}e^{\frac{F-E_p}{k_0T}} + 1} \quad (3.4.8)$$

Əgər n, p, N_a^+ və N_a^- -nin ifadəsini (3.4.2)-da yerinə yazsaq, ümumi halda Fermi səviyyəsinə görə dördüncü tərtibdən bir tənlik alacağıq.

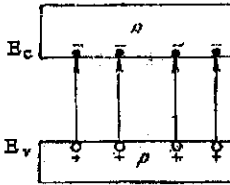
Bir burada yarımkeçiricidə yalnız iki növ aşqar səviyyəsinin olduğunu qəbul etdik. Çoxlu miqdarda aşqar səviyyələri mövcud olduqda F Fermi səviyyəsinin tapılması məsələsi daha da mürəkkəbləşir. Qeyd edək ki, (3.4.2) tənliyinin ümumi halda həlli çox mürəkkəb olsa da, o bir sıra xüsusi hallarda çox sadələşir. Bu halları araşdıraq.

§3.5. Məxsusi yarımkeçirici. Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı

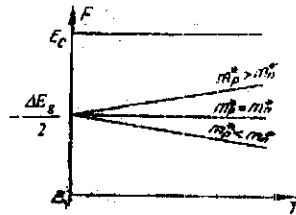
Yarımkeçiricidə kənar aşqar atomları olmadıqda, o, məxsusi yarımkeçirici adlanır. Bu halda $N_d = N_a = 0$ -dır. Onda (3.60) tənliyi çox sadə şəkil alır:

$$n = p, \quad (3.5.1)$$

yəni keçiricilik zonasında olan sərbəst elektronların sayı valent zonasında olan sərbəst deşiklərin sayına bərabərdir (şəkil 3.5). Cırılşmamış yarımkeçirici üçün (3.5.1)-dan yazarıq:



Şəkil 3.5.



Şəkil 3.6.

Məxsusi yarımkeçiricidə yükdaşıyıcıların istilik generasiyası

Məxsusi yarımkeçiricidə Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı

$$2 \left(\frac{2\pi m_n^* k_0 T}{h^2} \right)^3 e^{\frac{F}{k_0 T}} = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* k_0 T}{h^2} \right)^3 e^{\frac{F + \Delta E_g}{k_0 T}} \quad (3.5.2)$$

Buradan:

$$e^{\frac{2F + \Delta E_F}{2k_0T}} = \left(\frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*} \right)^2.$$

Bu düsturdan F -i tapa bilərik:

$$F = -\frac{\Delta E_F}{2} + \frac{k_0T}{2} \ln \left(\frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*} \right)^2. \quad (3.5.3)$$

$m_{dp}^* = m_{dn}^*$ olsa, onda Fermi səviyyəsi qadağan olunmuş zonanın ortasından keçir və temperaturdan asılı olmur (şəkil 3.6). $m_{dp}^* \neq m_{dn}^*$ olduqda mütləq sıfır temperaturunda Fermi səviyyəsi qadağan olunmuş zonanın ortasına düşür və temperatur artdıqca xətti olaraq ya keçiricilik zonasına ($m_{dp}^* > m_{dn}^*$) və ya da valent zonasına ($m_{dp}^* < m_{dn}^*$) yaxınlaşır.

Məxsusi yarımkəçirici üçün yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını n_i ilə işarə etsək, (3.3.34) ifadəsindən alarıq:

$$\begin{aligned} n_i = n = p &= \sqrt{np} = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{\Delta E_i}{2k_0T}} = \\ &= 4,82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{dn}^* m_{dp}^*}{m_0^2} \right)^{\frac{3}{4}} T^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\Delta E_i}{2k_0T}} = CT^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\Delta E_i}{2k_0T}}, \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

burada $C = 4,82 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{dn}^* m_{dp}^*}{m_0^2} \right)^{\frac{3}{4}} sm^{-3}$ verilmiş yarımkəçirici üçün sabit kəmiyyətdir. (3.5.4)-dan

$$n_i T^{\frac{3}{2}} = C e^{-\frac{\Delta E_i}{2k_0T}},$$

bu ifadəni loqarifmaladıqdan sonra:

$$\ln \left(n_i T^{\frac{3}{2}} \right) = \ln C - \frac{\Delta E_i}{2k_0T} = \frac{1}{T}. \quad (3.5.5)$$

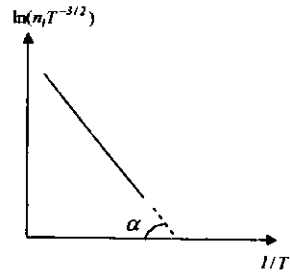
$$\text{Göründüyü kimi} \quad \ln \left(n_i T^{\frac{3}{2}} \right)$$

kəmiyyəti $\frac{1}{T}$ -dən xətti asılıdır (şəkil 3.7).

(3.5.5) ifadəsindən və 3.7-ci şəkildən aydındır ki,

$$\Delta E_i = 2k_0 T g \alpha.$$

Beləliklə, məxsusi yarımkəçiricidə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının temperaturdan asılılığı qadağan olunmuş zonanın enini təyin etməyə imkan verir.



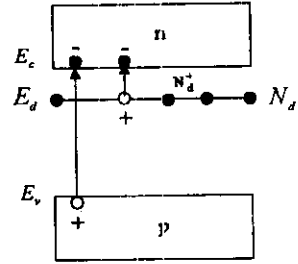
Şəkil 3.7. Məxsusi yarımkəçiricidə $\ln(n_i T^{-3/2}) = f(1/T)$

§3.6. Bir növ aşqarı olan yarımkəçirici

İndi də bir növ aşqar mərkəzi, deyək ki, donor tipli aşqarlar olan yarımkəçiriciyə baxaq: $N_d \neq 0, N_a = 0$. Bu halda neytrallıq tənliyi belə olur:

$$n - (p + N_d^*) = 0. \quad (3.6.1)$$

Ümumi halda bu tənlik F -ə görə üçüncü tərtibdəndir. İndi valent zonasında sərbəst dəşiklər yalnız məxsusi atomların ionlaşması hesabına, keçiricilik zonasında sərbəst elektronlar isə həm valent zonasından və həm də donor mərkəzindən elektronların keçiricilik zonasına keçməsi hesabına yaranır (şəkil 3.8). Ona görə də $p \ll N_d^*$ şərti ödənilən temperatur intervalında («aşağı» temperaturlarda) əsas rolu aşqar mərkəzləri, $p \gg N_d^* = N_d$ şərti ödənilən intervalda isə («yuxarı» temperaturlarda) əsas rolu valent zonasından keçiricilik zonasına gedən keçidlər oynayacaq. Hər iki halı ayrı-ayrılıqda araşdıraq.



Şəkil 3.8. Donor tipli aşqara malik yarımkəçiricidə yükdaşıyıcıların istilik generatsiyası

a) Aşağı temperaturlar. Qeyd etdiyimiz kimi, bu $p \ll N_d^*$ şərtini ödəyən temperatur intervalını əhatə edir. Onda (3.6.1) ifadəsində p -ni N_d^* -yə nisbətən nəzərə almaya bilərik. (3.3.19) və (3.4.5)-ü (3.6.1)-də nəzərə alsaq:

$$N_c e^{\frac{F}{k_B T}} - \left(N_d - \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - F}{k_B T}} + 1} \right) = 0$$

və ya

$$\frac{1}{2} N_c e^{\frac{E_d}{k_B T}} + N_c e^{\frac{F}{k_B T}} - \frac{1}{2} N_d e^{\frac{E_d - F}{k_B T}} = 0. \quad (3.6.2)$$

Belə əvəzləmə aparsaq:

$$e^{\frac{F}{k_B T}} = x, \quad (3.6.3)$$

$$\frac{1}{2} N_c e^{\frac{E_d}{k_B T}} + N_c x - \frac{1}{2} N_d e^{\frac{E_d}{k_B T}} \cdot x^{-1} = 0,$$

sadələşdirsək:

$$x^2 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d}{k_0 T}} x - \frac{N_d}{2N_c} e^{\frac{E_d}{k_0 T}} = 0. \quad (3.6.4)$$

Buradan:

$$x = \frac{1}{4} e^{\frac{E_d}{k_0 T}} \left[-1 \pm \sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_c} e^{-\frac{E_d}{k_0 T}}} \right], \quad (3.6.5)$$

burada $x > 0$ olduğunu nəzərə alsaq, kökaltı ifadənin qarşısındakı mənfi işarəni ata bilərik. Onda (3.6.3) və (3.6.5)-dan Fermi səviyyəsi üçün alırıq:

$$F = k_0 T \ln \left\{ \frac{1}{4} e^{\frac{E_d}{k_0 T}} \left[\sqrt{1 + \frac{8N_d}{N_c} e^{-\frac{E_d}{k_0 T}}} - 1 \right] \right\}. \quad (3.6.6)$$

Kifayət qədər aşağı temperaturlarda N_c -nin dəyişməsi hesabına aşağıdakı bərabərsizlik ödənilə bilər:

$$\frac{8N_d}{N_c} e^{-\frac{E_d}{k_0 T}} \gg 1. \quad (3.6.7)$$

Onda (3.6.6)-də vahidləri ata bilərik:

$$F = k_0 T \ln \left\{ \frac{1}{4} e^{\frac{E_d}{k_0 T}} \sqrt{\frac{8N_d}{N_c} e^{-\frac{E_d}{2k_0 T}}} \right\} = k_0 T \ln \left\{ \sqrt{\frac{N_d}{2N_c}} e^{\frac{E_d}{2k_0 T}} \right\} = \frac{E_d}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_d}{2N_c}. \quad (3.6.8)$$

Enerji keçiricilik zonasının dibindən ($E_c = 0$) hesablandığı üçün aşqar səviyyəsinə uyğun gələn enerji (aşqar səviyyəsinin «dərinliyi») mənfidir:

$$E_d < 0.$$

Nəzərə alsaq ki, E_d mütləq qiymətcə aşqar mərkəzinin ionlaşma enerjisinə (ΔE_d) bərabərdir, onda F üçün (3.6.8)-dan

$$F = -\frac{\Delta E_d}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right). \quad (3.6.9)$$

Buradan görünür ki, $T = 0$ olduqda $F = -\frac{\Delta E_d}{2}$ olur, yəni mütləq sıfırda

Fermi səviyyəsi keçiricilik zonası ilə aşqar səviyyəsi arasındakı məsafənin ortasından keçir. Temperaturun artması ilə F artaraq, keçiricilik zonasının dibinə yaxınlaşır, maksimum qiymət alır və sonra azalmağa başlayır, $2N_c = N_d$ qiymətində yenidən $F = -\frac{\Delta E_d}{2}$ olur (ancaq

burada (3.6.7) şərti ödənilməlidir, əks halda (3.6.9) ifadəsi doğru olmaz).

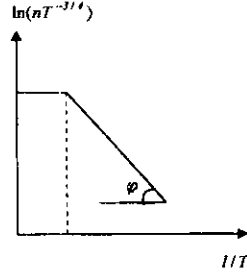
Elektronların konsentrasiyasını tapaq:

$$n = N_c e^{-\frac{\Delta E_c}{2k_0 T} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right)} = \left(\frac{N_d N_c}{2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\Delta E_c}{2k_0 T}},$$

$$n = \left(\frac{N_d N_c}{2} \right)^{1/2} e^{-\frac{\Delta \varepsilon_d}{2k_0 T}}, \quad (3.6.9a)$$

buradan görünür ki, yenə də $\ln(nT^{-3/4})$ kəmiyyətinin $\frac{1}{T}$ -dən asılılığı düz xətt verir (şəkil 3.9). Aşqar səviyyəsinin aktivləşmə enerjisini həmin düz xəttin meyl bucağı (φ) vasitəsilə tapmaq olar:

$$\Delta \varepsilon_d = 2 \cdot k_0 T \varphi.$$



Şəkil 3.9. Bir növ aşqar olan yarımkəçiricidə aşağı temperaturalarda $\ln(nT^{-3/4}) = f(1/T)$

İndi də (3.6.7)-ə əks olan şərtin ödənilməyi hala baxaq, yəni:

$$\frac{8N_d}{N_c} e^{-\frac{\Delta \varepsilon_d}{k_0 T}} \ll 1. \quad (3.6.11)$$

Aşqar mərkəzlərinin eyni bir N_d konsentrasiyasında (3.6.11)-nin doğru olması üçün nisbətən yuxarı temperaturlar tələb olunur və bu temperaturlarda həm də $N_c \gg 8N_d$ şərti ödənilməlidir. Onda (3.6.6) ifadəsini $y = \frac{8N_d}{N_c} \cdot e^{-\frac{\Delta \varepsilon_d}{k_0 T}}$ -nin üstlərinə görə sıraya ayıraraq, birinci iki hədlə kifayətlənsək:

$$F = k_0 T \ln \left[\frac{1}{4} e^{-\frac{\Delta \varepsilon_d}{k_0 T}} \left(1 + \frac{4N_d}{N_c} e^{-\frac{\Delta \varepsilon_d}{k_0 T}} + \dots - 1 \right) \right] = k_0 T \ln \frac{N_d}{N_c}. \quad (3.6.12)$$

$N_d \ll N_c$ olduğu üçün $\ln \frac{N_d}{N_c} < 0$ -dir. Deməli, temperatur artdıqca F keçiricilik zonasının dibindən aşağı düşür (uzaqlaşır).

Bu hal üçün elektronların konsentrasiyasını tapmaq:

$$n = N_c e^{-\frac{F}{k_0 T}} = N_c e^{-\ln \frac{N_d}{N_c}} = N_d, \quad (3.6.13)$$

yəni konsentrasiya temperaturdan asılı olaraq dəyişmir (bütün donor mərkəzləri ionlaşmışdır). Bu oblasta aşqar mərkəzlərinin (donorların) elektronlarının tam tükəndiyi oblast deyirlər. Burada artıq $N_d^+ = N_d$ -dir.

b) Yüksək temperaturlar. Temperaturu artırmaqda davam etsək, N_d^+ sabit ($N_d^+ = N_d$) olmaqla yükdaşıyıcıların konsentrasiyası məxsusi keçiricilik hesabına artacaqdır. Onda neytrallıq tənliyini belə yazıb bilərik:

$$n = p + N_d. \quad (3.6.14)$$

$p = \frac{n_i^2}{n}$ olduğunu nəzərə alsaq:

$$\begin{aligned} n - \frac{n_i^2}{n} - N_d &= 0, \\ n^2 - N_d n - n_i^2 &= 0. \end{aligned} \quad (3.6.15)$$

Buradan:

$$n = \frac{N_d}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right). \quad (3.6.16)$$

Burada biz mənfəi həlli fiziki mənə kəsb etmədiyi üçün atdıq. Deşiklərin konsentrasiyası:

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{2n_i^2}{N_d \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right)}. \quad (3.6.17)$$

Fermi səviyyəsi isə

$$F = k_0 T \ln \frac{n}{N_c} = k_0 T \ln \left\{ \frac{N_d}{2N_c} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_d^2}} \right) \right\} = \quad (3.6.18)$$

$$= k_0 T \ln \left\{ \frac{N_d}{2N_c} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4N_c N_v}{N_d^2} e^{-\frac{\Delta E_i}{k_0 T}}} \right) \right\}. \quad (3.6.19)$$

olduqda bundaq qabaq araşdırdığımız halı (donor mərkəzlərində elektronların tam tükənməsi halını),

$$\frac{4n_i^2}{N_d^2} \ll 1 \quad (3.6.19, a)$$

olduqda isə məxsusi keçiriciliyə malik olan aşqarlanmamış yarımqeçirici halını almış oluruq.

Beləliklə, yarımqeçiricidə yalnız bir növ aşqar mərkəzi olduqda Fermi səviyyəsinin qiyməti (3.6.6) və ya (3.6.18) ifadəsi ilə təyin olunur. 3.10-cu şəkildə donor mərkəzlərinin konsentrasiyasının üç qiyməti üçün F -in temperaturdan asılılığı göstərilmişdir:

$$1 - N_d, 2 - N_d, 3 - N_d, N_d > N_d, > N_d.$$

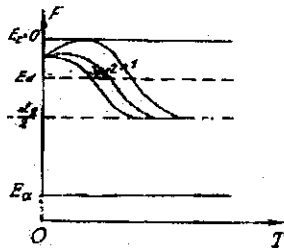
Akseptor tipli aşqar halı üçün eyni qayda ilə müvafiq ifadələri asanlıqla ala bilərik. Bu halda aşağı temperaturlar üçün:

$$F = k_0 T \ln \left\{ e^{\frac{\Delta E_g}{k_0 T}} \left(\sqrt{1 + \frac{8N_a}{N_v} e^{-\frac{\Delta E_g}{k_0 T}}} - 1 \right) \right\}, \quad (3.6.20)$$

nisbətən yuxarı temperaturlar üçün isə:

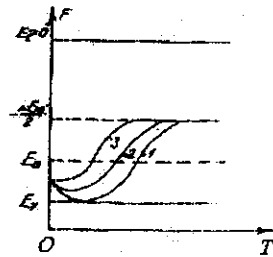
$$F = -\Delta E_g - k_0 T \ln \left\{ \frac{N_a}{2N_v} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_a^2}} \right) \right\} \quad (3.6.21)$$

3.11-ci şəkildə akseptor tipli aşqar mərkəzlərinin üç müxtəlif konsentrasiyası üçün yarımqeçiricidə Fermi səviyyəsinin temperaturdan asılılığı göstərilmişdir: 1 - N_{a1} , 2 - N_{a2} , 3 - N_{a3} , $N_{a1} > N_{a2} > N_{a3}$.



Şəkil 3.10.

Donor tipli aşqara malik yarımqeçiricidə Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı



Şəkil 3.11.

Akseptor tipli aşqara malik yarımqeçiricidə Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı.

§3.7. Donor və akseptor tipli iki müxtəlif aşqarı olan yarımqeçirici

İndi daha ümumi hala baxaq. Fərz edək ki, yarımqeçiricidə eyni zamanda bir donor tipli və bir dəne də akseptor tipli aşqar vardır. $T=0$ temperaturunda elektronlar ən aşağıda yerləşən səviyyələri tutacaqlar və deməli, nə keçiricilik zonasında sərbəst elektronlar, nə də valent zonasında sərbəst deşiklər olacaq. Əgər $N_d = N_a$ olsa, onda donor səviyyəsinin bütün elektronları onlardan aşağıda yerləşən akseptor mərkəzlərinə keçəcəklər. Ona görə də temperaturun artması ilə keçiricilik zonasına elektronlar valent zonasından və mənfi yüklənmiş akseptor mərkəzlərindən keçəcəkdir (donor mərkəzlərinin hamısı öz elektronlarını itirdiyi üçün onlar keçiricilik zonasına elektron verə bilməzlər). Akseptor

mərkəzləri enerji diaqramında təqribən valent zonasının maksimum ilə eyni səviyyədə olduğu üçün uyğun keçidlərin sayının nisbəti məxsusi atomlarla akseptor mərkəzlərinin konsentrasiyalarının nisbəti ilə xarakterizə olunacaqdır. Ona görə də bu halda kristal özünü məxsusi yarımkeçirici kimi aparacaq və Fermi səviyyəsi qadağan olunmuş zonanın ortasından keçəcəkdir (və ya ona yaxın olacaqdır). Burada müxtəlif tipli aşqar səviyyələri bir-birinin təsirini «neytrallaşdırır» (hər iki aşqar səviyyəsi «tükənmiş» hala gəlir). Belə yarımkeçiriciyə kompensasiya olunmuş yarımkeçirici deyirlər. Aydın ki, bu halda $N_d^+ = N_a^-$ olur və neytrallıq tənliyi $n = p$ şəklini alır ki, onu da biz yuxarıda araşdırmışıq.

İndi fərz edək ki, $N_d \neq N_a$ -dır. Məsələn, $N_d > N_a$ olsun. Onda donor mərkəzlərinin bir hissəsi bütün akseptor mərkəzlərini neytrallaşdıracaq və yerdə qalan $N_d^+ = N_d - N_a$ donor mərkəzləri, konsentrasiyası N_d^+ olan bir növ aşqar rolunu oynayacaqdır. Belə yarımkeçiriciyə qismən kompensasiya olunmuş yarımkeçirici deyilir. Bu hal bir növ aşqarı olan yarımkeçirici halından bir qədər fərqlənir. Neytrallıq tənliyini yazaq:

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (3.7.1)$$

Mütləq sifra yaxın ($T \rightarrow 0$) temperaturalarda sərbəst elektronların və deşiklərin konsentrasiyasını N_d^+ və N_a^- -ya nisbətən nəzərə almaya bilərik:

$$n \ll N_d^+, p \ll N_a^-,$$

onda (3.7.1)-dən:

$$N_a^- = N_d^+ \quad (3.7.2)$$

$$N_a^- = N_a \quad \text{və} \quad N_d^+ = N_d - \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - F}{kT}} + 1}$$

olduğu üçün (3.7.2)-dən:

$$\frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - F}{kT}} + 1} = N_d - N_a = N_d^+ \quad (3.7.3)$$

Buradan:

$$e^{\frac{E_d - F}{kT}} = 2 \frac{N_d - N_d^+}{N_d} = \frac{2N_a}{N_d - N_a} \quad (3.7.4)$$

və ya

$$F = E_d + k_0 T \ln \frac{N_d - N_a}{2N_a} \quad (3.7.5)$$

Göründüyü kimi, $T = 0$ -da Fermi səviyyəsi aşqar səviyyəsi ilə üst-üstə düşür: $F = E_d$; n -in F -lə əlaqəsini və $E_d = -\Delta\varepsilon_d$ olduğunu nəzərə alsaq:

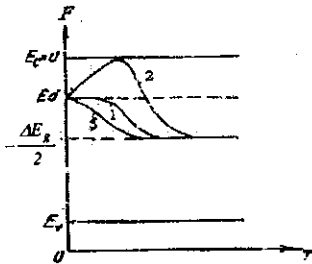
$$n = N_c e^{\frac{F}{kT}} = N_c \cdot \frac{N_d - N_a}{2N_c} e^{\frac{\Delta\epsilon_d}{kT}}. \quad (3.7.6)$$

Bu halda aktivləşmə enerjisi donor mərkəzinin ionlaşma enerjisinə bərabərdir, ancaq «təmiz» donor tipli aşqarı olan yarımkəçiricidə aktivləşmə enerjisinin yarısına $\left(\frac{\Delta\epsilon_d}{2}\right)$ bərabərdir. Bu halda $\Delta\epsilon_d$ -ni təyin etmək üçün $\ln\left(nT^{\frac{3}{2}}\right)$ -nin $\frac{1}{T}$ -dən asılılığını qurmaq və $\Delta\epsilon_d$ -ni belə hesablamaq lazımdır:

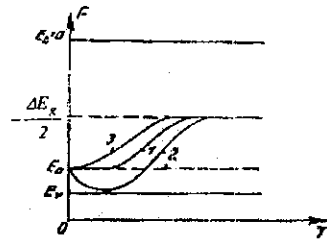
$$\Delta\epsilon_d = k_0 t g \varphi. \quad (3.7.7)$$

(3.7.5) və (3.7.6) ifadələri aşağı temperaturlarda ($T \rightarrow 0$) doğrudur. Özü də $n \ll N_c < N_d$ şərti ödənilməlidir. (3.7.6)-dən görüldüyü kimi, aşqar səviyyəsi dərin olduqca (3.7.4) və (3.7.6) ifadələrinin ödənilməyi temperatur intervalının yuxarı sərhədi də böyük olur.

(3.7.5)-dən görünür ki, $N_d = 3N_a$ olsa, Fermi səviyyəsi $F = E_d$ donor səviyyəsi ilə üst-üstə düşür və özü də temperaturdan asılı olmur. $N_d > 3N_a$ olduqda temperaturun artması ilə F yuxarı qalxır (artır). $N_d < 3N_a$ (ancaq $N_d > N_a$) olduqda temperaturun artması ilə F aşağı düşür (əlbət ki, $n \ll N_c$ şərti ödənilən temperaturlara qədər). Hər üç hal 3.12-ci şəkildə göstərilmişdir ($1 - N_d = 3N_a$; $2 - N_d > 3N_a$; $3 - N_d < N_d < 3N_a$).



Şəkil 3.12. Donor və akseptor tipli aşqarlara malik yarımkəçiricidə Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı



Şəkil 3.13. Akseptor tipli aşqar mərkəzlərinə malik yarımkəçiricidə Fermi səviyyəsinin temperatur asılılığı

Yarımkəçiricidə akseptor tipli aşqarın konsentrasiyası donor tipli aşqarın konsentrasiyasından böyük ($N_d < N_a$) olduqda $T \rightarrow 0$ halı üçün analogi olaraq alarıq:

$$F = E_a - k_0 T \ln \frac{N_a - N_d}{2N_d} \quad (3.7.8)$$

və

$$p = N_v \cdot \frac{N_a - N_d}{2N_d} e^{\frac{\Delta \epsilon_d}{k_0 T}}. \quad (3.7.9)$$

Bu halda üç müxtəlif konsentrasiya üçün Fermi səviyyəsinin temperaturdan asılılığı 3.13-cü şəkildə göstərilmişdir ($1 - N_a = 3N_d$; $2 - N_a > 3N_d$; $3 - N_d < N_a < 3N_d$). Donor tipli aşqarın konsentrasiyası üstünlük təşkil edəndə apardığımız mühakimələr eyni ilə burada da öz qüvvəsində qalacaqdır.

Nəhayət, nisbətən yuxarı temperaturalara düşən bir halı da nəzərdən keçirək. Bunun üçün fərz edək ki, $N_d > N_a$ -dır və həm də baxdığımız temperatur intervalında məxsusi keçiriciliyi nəzərə almamaq mümkündür. Onda $p \approx 0$ və neytrallıq tənliyi belə yazıla bilər:

$$n + N_a^- = N_d^+, \quad (3.7.10)$$

$$N_c e^{\frac{F}{k_0 T}} + N_a = N_d - \frac{N_d - N_a}{\frac{1}{2} e^{\frac{\Delta \epsilon_d - F}{k_0 T}} + 1}, \quad (3.7.11)$$

bu ifadədə $N_d - N_a = N_d'$ işarə etsək, görürük ki, bu tənlik (3.6.2)-lə eynidir. Aşağı temperatur intervalı üçün (3.6.8)-a analoji olaraq yazırıq:

$$F = -\frac{\Delta \epsilon_d}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_d - N_a}{2N_c}, \quad (3.7.12)$$

$$n = \sqrt{\frac{(N_d - N_a)N_c}{2}} e^{\frac{\Delta \epsilon_d}{2k_0 T}}. \quad (3.7.13)$$

(3.7.5) və (3.7.6)-dən fərqli olaraq, (3.7.12) və (3.7.13) $T = 0$ temperaturu üçün ödənilir, çünki bu zaman $N_c \rightarrow 0$.

Uyğun ifadələri $N_a > N_d$ halı üçün də ala bilərik. Beləliklə, yarımkəçiricidə kompensasiyaedici aşqarın olması Fermi səviyyəsinin daha sürətlə dəyişməsi ilə nəticələnir.

IV FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ KİNETİK HADİSƏLƏR

§ 4.1. Bolsmanın kinetik tənliyi

Biz indiyədək kristalda olan yükdaşıyıcıların hamısına birlikdə termodinamik tarazlıqda olan zərrəciklər sistemi kimi baxırdıq. Burada elektronun halını tarazlıq paylanma funksiyası təsvir edirdi:

$$f_0(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-F}{kT}} + 1} \quad (4.1.1)$$

Kristal xarici sahənin (elektrik, maqnit və ya temperatur sahələrinin) təsirinə məruz qaldıqda isə yükdaşıyıcıların hərəkəti nizamlı (istiqamətlənmiş) xarakter daşıyır və onların halı artıq başqa – qeyri-tarazlıq paylanma funksiyası ilə təsvir olunur. İndi paylanma funksiyası koordinatdan (\vec{r}), dalğa vektoru (\vec{k}) və ya kvazi-impulsdan ($\vec{p} = \hbar\vec{k}$) və eləcə də zamandan (t) asılı olur: $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$.

Xarici və daxili sahələrin (o cümlədən temperatur qradientinin) təsiri nəticəsində kristalda yükdaşıyıcıların hərəkəti zamanı baş verən hadisələrə kinetik hadisələr (və ya daşınma hadisələri) deyilir. Buraya elektrik keçiriciliyi, istilik keçiriciliyi, qalvanomaqnit, termomaqnit və termoelektrik hadisələri daxildir. Yarımkeçiricilərdə kinetik hadisələri kəmiyyətə şərh etmək üçün yararlı olan ən güclü vasitə Bolsmanın kinetik tənliyidir. Bu tənlik müxtəlif səbəblərin təsirini nəzərə almaqla yükdaşıyıcıların halının dəyişməsinə təsvir edir. Məlumdur ki, tarazlıqda olan sistemin halı onun daxilində ayrı-ayrı hissələr arasında baş verən qarşılıqlı təsirin mexanizmindən asılı deyil. Lakin xarici sahənin təsiri nəticəsində bu tarazlıq pozulduqda sistemin halı qarşılıqlı təsir mexanizmindən asılı olur. Ona görə də kinetik hadisələr yükdaşıyıcıların kristaldakı qüsurlarla qarşılıqlı təsir mexanizmindən kəskin asılı olur.

Aydındır ki, qeyri-tarazlıq halında da paylanma funksiyasının mənası tarazlıq halındakına uyğundur. Məsələn,

$$f(k_x, k_y, k_z, x, y, z, t) \frac{1}{4\pi^3} dk_x dk_y dk_z dx dy dz$$

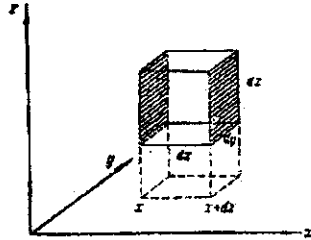
t anında koordinatları x, y, z olan nöqtədə $dx dy dz$ həcmində dalğa vektoru k_x və $k_x + dk_x$, k_y və $k_y + dk_y$, k_z və $k_z + dk_z$ intervalında dəyişən elektronların sayıdır.

Daşınma hadisələrinin öyrənilməsində əsas məsələ qeyri-tarazlıq halına uyğun gələn paylanma funksiyasını tapmaqdır. Bunun üçün isə Bolsmanın kinetik tənliyini həll etmək lazım gəlir. Ona görə də biz bu tənliyi çıxaraq.

Yükdaşıyıcının halını öyrənmək üçün onun hərəkətinə həm adi koordinat fəzasında, həm də dalğa vektoru (kvaziimpuls) fəzasında baxmaq lazımdır. Koordinat fəzası daha əyani olduğu üçün əvvəlcə elektronun hərəkətinə adi həndəsi fəzada baxaq. Hər hansı kubşəkilli

həcm elementini götürək (şəkil 4.1) $d^3r = dx dy dz$. Tutaq ki, elektronun sürətinin komponentləri v_x, v_y, v_z -dir.

Götürdüyümüz həcm elementində kiçik dt müddətində sol $dy dz$ üzündən elektronların daxil olması (burada $v_x > 0$ qəbul edirik) və sağ $dy dz$ üzündən çıxması nəticəsində onların sayının dəyişməsinə baxaq. Sürəti \bar{v} ilə $\bar{v} + d\bar{v}$ (dalğa vektoru \bar{k} ilə $\bar{k} + d\bar{k}$) intervalında olan və dt müddətində sol $dy dz$ səth elementindən baxdığımız həcmə daxil olan elektronların sayı:



Şəkil 4.1. Adi həndəsi fəzada kubşəkilli həcm elementi

$$f(\bar{v}, x, y, z, t) \frac{1}{4\pi^3} dk_x dk_y dk_z dy dz v_x dt.$$

Sağ $dy dz$ səth elementindən dt müddətində çıxan elektronların sayı isə:

$$f(\bar{v}, x + dx, y, z, t) \frac{1}{4\pi^3} dk_x dk_y dk_z dy dz v_x dt.$$

Nəticədə baxdığımız həcm elementində elektronların sayının dəyişməsi:

$$\begin{aligned} & (f(\bar{v}, x, y, z, t) - f(\bar{v}, x + dx, y, z, t)) \frac{1}{4\pi^3} dk_x dk_y dk_z dy dz v_x dt = \\ & = - \frac{f(\bar{v}, x + dx, y, z, t) - f(\bar{v}, x, y, z, t)}{dx} \frac{1}{4\pi^3} d\tau_x d\tau_y v_x dt. \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

Burada $dk_x dk_y dk_z = d\tau_x$ və $dx dy dz = d\tau_y$ ilə əvəz etdik. Axırncı ifadədə birinci vuruğun funksiyasının x -ə görə birinci tərtib törəməsi olduğunu nəzərə alsaq, (4.1.2) -nin əvəzinə belə bir ifadə alarıq:

$$-v_x \frac{\partial f}{\partial x} \cdot \frac{\partial \tau_x}{4\pi^3} d\tau_y dt. \quad (4.1.2 a)$$

Qalan iki istiqamət üçün də eyni mühakimələri təkrar etsək, $d\tau_x$ həcmində elektronların sayının yekun dəyişməsi üçün alarıq:

$$\begin{aligned} & - \left(v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} \right) \frac{d\tau_x}{4\pi^3} d\tau_y dt = \\ & = - (\bar{v} \nabla, f) \frac{d\tau_x}{4\pi^3} d\tau_y dt = - \bar{v} \frac{\partial f}{\partial \bar{r}} \frac{d\tau_x}{4\pi^3} d\tau_y dt. \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

Burada $\bar{v} = d\bar{r}/dt$ - yükdaşıyıcıların sürətidir. $d\tau$, həcmində elektronların sayının bu dəyişməsi onların temperatur qradienti və ya maddənin bircinsli olmaması nəticəsində mövcud olan konsentrasiya qradienti boyunca baş verən diffuziyası nəticəsində yaranan köçürmə hadisəsi ilə bağlıdır.

Dalğa vektoru fəzasında $d\tau_x$ elementar həcmində elektronların sayının dt müddətindəki dəyişməsini eyni qayda ilə tapa bilərik. Aydındır ki, burada koordinat oxlarını uyğun olaraq k_x, k_y, k_z həcm elementini isə dk_x, dk_y, dk_z -lə əvəz etmək lazımdır. Sadə mühakimələrdən sonra asanlıqla alırıq:

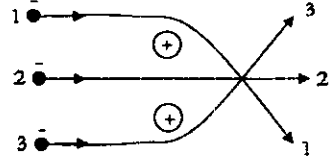
$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\partial k_x}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_x} + \frac{\partial k_y}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_y} + \frac{\partial k_z}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial k_z} \right) \frac{\partial \tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt = \\ & = - \left(\frac{d\bar{k}}{dt} \nabla_{\bar{k}} f \right) \frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt = - \frac{2\pi}{h} (\bar{v} \nabla_{\bar{k}} f) \frac{\partial \tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt, \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

burada $\bar{F}(\bar{r}, t) = \frac{d\bar{p}}{dt} = \hbar \frac{d\bar{k}}{dt}$, t anında \bar{r} nöqtəsində elektrona təsir edən qüvvədir. Beləliklə, (4.1.4) ifadəsi elektronların sayının xarici elektrik və maqnit sahələrinin təsiri nəticəsində dəyişməsini ifadə edir. Bundan başqa yükdaşıyıcılar öz hərəkətləri zamanı kristal quruluşunun qüsurları – periodikliyin istənilən tərzdə pozulması (məsələn, kənar aşqar atomu, atomların istilik rəqsi, dislokasiya, vakansiya və s.) ilə rastlaşır və onlarla qarşılıqlı təsirdə olur. Bu isə öz növbəsində baxdığımız $d\tau_x$ və $d\tau_y$ həcm elementində yükdaşıyıcıların sayının dəyişməsinə səbəb olur. Adətən kristal qəfəsində periodikliyin pozulmasının yaratdığı həyəcanlaşdırıcı təsir bir neçə elementar özəyi əhatə edir. Bu cür mərkəz 10^{-7} sm tərtibində olan məsafədə təsir göstərir. Otaq temperaturunda elektronun istilik enerjisinə uyğun gələn orta sürəti $\sim 10^7$ sm/san olduğunu nəzərə alsaq, burada qarşılıqlı təsir müddətinin $\sim 10^{-14}$ san olduğunu görürük. Belə qısa müddətli qarşılıqlı təsir zamanı koordinat dəyişməsi nəzərə alınmaz dərəcədə kiçik ($\sim 10^{-7}$ sm) olsa da, sürət (və ya kvazi-irapuls) vektoru kəskin dəyişir. Belə qısa müddətli qarşılıqlı təsir mexanikada zərbə və ya toqquşma prosesini xatırladır. Odur ki, bu cür qarşılıqlı təsiri sadəcə olaraq toqquşma adlandırırlar. Hər bir toqquşma aktında verilmiş istiqamətdə hərəkət edən yükdaşıyıcıların sayı dəyişir. Ona görə də toqquşma prosesini səpilmə prosesi də adlandırırlar. Əksər halda elektronun (və ya deşiyin) səpilməsi elastiki olur. Bu zaman toqquşmada iştirak edən zərrəciklərin kinetik enerjisi saxlanır (toqquşmadan əvvəlki kinetik enerjilərin cəmi toqquşmadan sonrakı kinetik enerjilərin cəminə bərabər olur). Biz burada elastiki səpilməyə baxacağıq. Xarici elektrik və

maqnit sahəsi kimi, hər bir səpici mərkəz də yükdaşıyıcı onun təsir oblastına düşdükdə müəyyən qüvvə ilə ona təsir edir və onun kvazi-impulsunu dəyişdirir. İmpuls dəyişməsinə hər bir zərrəcik üçün belə ifadə edə bilərik:

$$\delta \vec{p} \equiv \int_0^t \vec{F}'(t') dt' . \quad (4.1.5)$$

Xarici sahə üçün (4.1.5) ifadəsini hesablamaq mümkündür, çünki F -in zamandan asılılığı məlumdur, xüsusi halda o, sabitdir. Ancaq səpici mərkəzin yaratdığı impuls dəyişməsinə (4.1.5) ifadəsindən hesablamaq mümkün deyil. Bu, 4.2-ci şəkildə asanlıqla aydın olur. Başlanğıc impulsları eyni olan üç elektron müsbət yüklü iki səpici mərkəzə yaxınlaşır. Hər üç elektronun səpilmədən sonra impulsunun dəyişməsi müxtəlifdir. Çünki elektronlara təsir edən qüvvə onların fəzadakı vəziyyətindən asılı olur. Ona görə səpilmə prosesini $d\tau_x$ və $d\tau_k$ həcm elementlərində elektronların sayının dəyişməsinə verdiyi payı dinamika qanunları ilə hesablamaq mümkün deyil. Bunu statistik üsulla etmək lazım gəlir.



Şəkil 4.2. İonların sahələrinin elektronların kvaziimpulslarının dəyişməsinə təsiri

Tutaq ki, elektron kristal qəfəsinin hər hansı qüsuru ilə toqquşduqdan sonra (\vec{r}, \vec{k}) halından (\vec{r}', \vec{k}') halına keçmişdir. Vahid zamanda bu cür keçidin baş vermə ehtimalını $W(\vec{k}, \vec{k}')$ -lə işarə edək. Yuxarıda gördük ki, toqquşma nəticəsində yükdaşıyıcıların koordinatları ciddi dəyişikliyə məruz qalmır. Odur ki, keçid ehtimalı koordinatdan $(\vec{r}$ və $\vec{r}')$ asılı deyil. Belə keçidin baş verməsi üçün \vec{k}' halında boş səviyyələr olmalıdır.

Səpilmə nəticəsində dt müddətində \vec{k} halından \vec{k}' halına keçən elektronların sayı keçid ehtimalından, \vec{k} halında olan ilkin dolu səviyyələrin və \vec{k}' halında olan boş səviyyələrin sayından asılıdır. Dalğa vektoru fəzasında (\vec{k} fəzada) \vec{k} və \vec{k}' vektorları ilə xarakterizə olunan iki həcm elementinə baxaq: $d\tau_k$ və $d\tau_{k'}$. Spin cırlaşmasını da nəzərə aldıqda bu həcm elementlərində olan kvant səviyyələrinin sayı vahid həcmli kristal üçün uyğun olaraq $\frac{\partial \tau_k}{4\pi^3}$ və $\frac{\partial \tau_{k'}}{4\pi^3}$ -dur. $d\tau_k$ və $d\tau_{k'}$ həcmələrində elektronla tutulmuş (dolu) səviyyələrin sayı: $f(\vec{r}, \vec{k}, t) \frac{\partial \tau_k}{4\pi^3}$ və, $f(\vec{r}, \vec{k}', t) \frac{\partial \tau_{k'}}{4\pi^3}$

boş səviyyələrin sayı isə: $[1 - f(\bar{r}, \bar{k}, t)] \frac{d\tau_k}{4\pi^3}$ və $[1 - f(\bar{r}, \bar{k}', t)] \frac{\partial \tau_k}{4\pi^3}$ olacaq. Səpilmə nəticəsində $d\tau_k$ həcm elementindən $d\tau_{k'}$, həcm elementinə keçən elektronların sayı belə ifadə olunacaq:

$$-f(\bar{r}, \bar{k}, t)W(\bar{k}, \bar{k}') [1 - f(\bar{r}, \bar{k}', t)] \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} d\tau, dt, \quad (4.1.6)$$

burada $d\tau_{k'}$ - kristalın həcm elementidir. Bununla yanaşı əks keçidlər də mövcuddur. Onda $d\tau_{k'}$ halından $d\tau_k$ halına keçən elektronların sayı:

$$f(\bar{r}, \bar{k}, t)W(\bar{k}', \bar{k}) [1 - f(\bar{r}, \bar{k}, t)] \frac{\partial \tau_k}{4\pi^3} \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} d\tau, dt. \quad (4.1.7)$$

Burada $W(\bar{k}', \bar{k})$ - elektronun bir saniyədə \bar{k}' halından \bar{k} halına keçmə ehtimalıdır. Beləliklə, $d\tau_k$ həcm elementində elektronların sayının dəyişməsi:

$$\{f(\bar{k}')W(\bar{k}', \bar{k}) [1 - f(\bar{k})] - f(\bar{k})W(\bar{k}, \bar{k}') [1 - f(\bar{k}')]\} \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} d\tau, dt. \quad (4.1.8)$$

(4.1.8) ifadəsində yazılışı sadələşdirmək xatirinə f funksiyası üçün arqument kimi yalnız \bar{k} -ni (dalğa vektoru) saxladıq. Çünki toqquşma zamanı \bar{r} -in dəyişməsinə nəzərə almamaq olar zaman isə aydındır ki, hər iki hal üçün eynidir. Ancaq yadda saxlamaq lazımdır ki, qeyri-tarazlıq halı üçün paylanma funksiyası ümumiyyətlə koordinat və zamandan da asılıdır.

İndi səpilmə nəticəsində dt müddətində $d\tau_k$ həcm elementində elektronların sayının tam dəyişməsinə tapmaq üçün (4.1.8) ifadəsini \bar{k}' vektorunun bütün qiymətləri üzrə (başqa sözlə Brilliyen zonasının bütün həcmi V_B üzrə) inteqrallamaq lazımdır:

$$\frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt \int_{(V_B)} \{f(\bar{k}')W(\bar{k}', \bar{k}) [1 - f(\bar{k})] - f(\bar{k})W(\bar{k}, \bar{k}') [1 - f(\bar{k}')]\} \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}. \quad (4.1.9)$$

Digər tərəfdən, t və $t + dt$ intervalında $d\tau_k d\tau$, həcm elementində elektronların sayının dəyişməsinə başqa cür də yaza bilərik:

$$\begin{aligned} & f(\bar{r}, \bar{k}, t + dt) \frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau - f(\bar{r}, \bar{k}, t) \frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau, = \\ & = \frac{f(\bar{r}, \bar{k}, t + dt) - f(\bar{r}, \bar{k}, t)}{dt} \frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt = \frac{\partial f}{\partial t} \frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt. \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

Aydındır ki, (4.1.10) ifadəsi (4.1.3), (4.1.4) və (4.1.9) ifadələrinin cəminə bərabərdir. Bu bərabərliyi yazıb və hər iki tərəfi bütün hədlər üçün ümumi olan $\frac{d\tau_k}{4\pi^3} d\tau, dt$ hasilinə ixtisar etsək, alarıq:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -(\bar{v}\nabla_i f) - \frac{2\pi}{h}(\bar{F}\nabla_i f) + \int_{(v_s)} \{f(\bar{k}')W(\bar{k}',\bar{k})[1-f(\bar{k})] - f(\bar{k})W(\bar{k},\bar{k}') [1-f(\bar{k}')]\} \frac{d\tau_k}{4\pi^3}. \quad (4.1.11)$$

Bu tənlik Bolsmanın kinetik tənliyi adlanır. Sağ tərəfin üçüncü həddində axtarılan f funksiyası inteqral altında olduğu üçün o, inteqral-diferensial tənlikdir. Sağ tərəfdəki birinci iki hədd birlikdə sahə həddi deyirlər və onu $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sah}$ ilə işarə edirlər:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sah} = -(\bar{v}\nabla_i f) - \frac{1}{h}(\bar{F}, \nabla_i f). \quad (4.1.12)$$

Sahə həddi elektronun arasıkəsilməz hərəkəti nəticəsində paylanma funksiyasının \bar{r} və \bar{k} fəzasında dəyişməsinə təyin edir. (4.1.11)-in sağ tərəfindəki üçüncü hədd toqquşma (və ya səpilmə) inteqralı adlanır və $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{toq}$ ilə işarə edilir:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{toq} = \int_{(v_s)} \{f(\bar{k}')W(\bar{k}',\bar{k})[1-f(\bar{k})] - f(\bar{k})W(\bar{k},\bar{k}') [1-f(\bar{k}')]\} \frac{d\tau_k}{4\pi^3}. \quad (4.1.13)$$

(4.1.13) səpilmə nəticəsində f -in dəyişməsinə təyin edir.

Aydın ki, Bolsmanın (4.1.11) kinetik tənliyini həll etmək üçün \bar{F} qüvvəsini və W keçid ehtimalını bilmək lazımdır.

Daşınma hadisələrini təyin edən kəmiyyətlər (elektrik cərəyanının sıxlığı, istilik seli, elektrik sahəsinin intensivliyi və s.) zamandan asılı deyilsə, onda proses qərarlaşmış (stasionar) proses adlanır. Qərarlaşmış hal üçün:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sah} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{toq} = 0 \quad (4.1.14)$$

yaxud

$$(\bar{v}\nabla_i f) + \frac{1}{h}(\bar{F}\nabla_i f) = \int_{(v_s)} \{f(\bar{k}')W(\bar{k}',\bar{k})[1-f(\bar{k})] - f(\bar{k})W(\bar{k},\bar{k}') [1-f(\bar{k}')]\} \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \quad (4.1.15)$$

(4.1.14) və ya (4.1.15)-dən aydın görünür ki, qərarlaşmış halda elektronun hərəkəti və xarici sahənin ona göstərdiyi təsir nəticəsində paylanma funksiyasının dəyişməsinə səpilmə prosesi kompensasiya edir.

Kinetik tənliyin tətbiq olunma şərti aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

1. Xarici təsir elektronun kristalda enerji spektrini dəyişməməlidir. Bu, xarici sahələrin qiymətinə məhdudiyət qoyur.

2. Kinetik tənlik kvaziklassik olduğundan o, kiçik həcmlərdə qısa müddətlərdə baş verən hadisələrin təsviri üçün yararlı deyil, belə ki, bu, enerji və kvaziimpulsun böyük qeyri-müəyyənliyinə gətirib çıxarır.

Kvant mexanikasında müfəssəl tarazlıq prinsipindən məlumdur ki, statistik tarazlıq halında düz ($\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$) və əks ($\vec{k}' \rightarrow \vec{k}$) keçidlər üçün elektronların seli eyni olmalıdır, yəni:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') f_0(E) [1 - f_0(E')] = W(\vec{k}', \vec{k}) f_0(E') [1 - f_0(E)]. \quad (4.1.16)$$

Tarazlıq halı üçün paylanma funksiyasının (4.1.1) ifadəsindən istifadə edib, müəyyən sadələşdirmə apardıqdan sonra (4.1.16)-dan:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') f_0(E) e^{-\frac{E-E'}{k_0 T}} f_0(E') = W(\vec{k}', \vec{k}) f_0(E') e^{-\frac{E-E'}{k_0 T}} f_0(E)$$

yaxud

$$W(\vec{k}, \vec{k}') e^{\frac{E'}{k_0 T}} = W(\vec{k}', \vec{k}) f_0(E') e^{\frac{E}{k_0 T}}. \quad (4.1.17)$$

Elastiki səpilmə üçün $E' = E$ -dir. Onda

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}', \vec{k}), \quad (5.18)$$

yəni səpilmə prosesində düz və əks keçidlərin ehtimalı eynidir. Bunu nəzərə alsaq toqquşma inteqralını (4.1.13) daha sadə şəkllə sala bilərik:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{toq}} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_0)} W(\vec{k}, \vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] d\tau_{k'}. \quad (4.1.19)$$

Tarazlıq halında da qərarlaşmış halda olduğu kimi $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, yəni

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{toq}} = - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{toq}} \quad \text{və deməli:}$$

$$(\vec{v} \nabla, f_0) + \frac{2\pi}{h} (\vec{F} \nabla, f_0) = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_0)} W(\vec{k}, \vec{k}') [f_0(\vec{k}') - f_0(\vec{k})] d\tau_{k'}. \quad (4.1.20)$$

Tarazlıq halında sol tərəf sıfıra bərabərdir. Bunu f_0 -in (4.1.1) ifadəsindən istifadə etməklə asanlıqla göstərmək olar. Bunun üçün həm də nəzərə alaq ki, elektronun tam enerjisi kinetik və potensial enerjilərin cəminə bərabərdir: $E = E_k + E_n$ və $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ -dir. Onda:

$$\begin{aligned} (\vec{v} \nabla, f_0) &= \frac{1}{k_0 T} \frac{e^{-\frac{E-F}{k_0 T}}}{\left(e^{-\frac{E-F}{k_0 T}} + 1 \right)^2} \vec{v} \cdot (-\nabla, E_n) = \frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{E-F}{k_0 T}} f_0^2 (\vec{v} \vec{F}), \\ \frac{1}{h} (\vec{F} \nabla, f_0) &= -\frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{E-F}{k_0 T}} f_0^2 \frac{1}{m} (\hbar \vec{k} \vec{F}) = -\frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{E-F}{k_0 T}} f_0^2 (\vec{v} \vec{F}). \end{aligned} \quad (4.1.22)$$

(4.1.21) və (4.1.22)-nin cəmi sıfırdır. Onda (4.1.20)-nin sağ tərəfi də sıfıra bərabərdir:

$$\frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W(\vec{k}, \vec{k}') [f_0(\vec{k}') - f_0(\vec{k})] d\tau_k = 0. \quad (4.1.23)$$

\vec{k} -nin ixtiyari qiymətində (4.1.23) bərabərliyinin doğru olması üçün:

$$f_0(\vec{k}') = f_0(\vec{k}). \quad (4.1.24)$$

Fermi-Dirak paylanma funksiyasından istifadə etsək, (4.1.24)-dən alarıq:

$$E' + F' = E + F. \quad (4.1.25)$$

Termodinamik tarazlıq halında elektronun tam enerjisi sabit olduğu üçün $E' = E$ -dir. Onda

$$F' = F, \quad (4.1.26)$$

yəni termodinamik tarazlıq halında sistemin aralarında elektron keçidi mümkün olan bütün hissələrində Fermi səviyyəsi eynidir.

§ 4.2. Relaksasiya müddəti

Bolsmanın kinetik tənliyini ümumi şəkildə (4.1.11) tənliyini hətta qərarlaşmış hal üçün həll etmək olduqca çətindir. Lakin relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etmək (4.1.11) tənliyini asanlıqla həll etməyə imkan verir. Bu işə o vaxt mümkündür ki, səpilmə prosesi elastiki olsun (toqquşmadan sonra yükdaşıyıcılarının enerjisi nəzərə alınmayacaq dərəcədə dəyişsin) və səpilmə nəticəsində elektronların sürəti təsadüfi paylansın.

İndi tutaq ki, sistmə xarici sahə təsir edir və $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ bu hala uyğun qeyri-tarazlıq paylanma funksiyasıdır. Zamanın $t = 0$ anında xarici sahənin təsirini kəsək. Onda biricins sistem üçün $(\nabla_k f = 0)$ Bolsman tənliyində sahə həddi $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{sah}$ olacaq və yükdaşıyıcıların toqquşması (səpilməsi) nəticəsində müəyyən müddətdən sonra sistem özünün əvvəlki tarazlıq halına qayıdacaq. Tarazlıq halında paylanma funksiyası f_0 -dır.

Artıq kinetik tənlik belə olar:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{toq}. \quad (4.2.1)$$

Bu o deməkdir ki, sahə kəsildikdən sonra paylanma funksiyasının dəyişməsi $(f - f_0)$ yalnız toqquşmaların hesabına olur. Yükdaşıyıcıların paylanması tarazlıq halından çox kəskin fərqlənmədikdə güman etmək olar ki, xarici sahə kəsildikdə paylanma funksiyasının səpilmə nəticəsində

dəyişməsi $(f - f_0)$ fərqi ilə mütənasib olacaq (yeni tarazlığın bərpa olunma sürəti $(f - f_0)$ fərqi ilə mütənasibdir):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\infty} = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (4.2.2)$$

burada τ -mütənasiblik əmsəlidir. τ -nu müsbət kəmiyyət qəbul etdiyimiz üçün sağ tərəfdə mənfi işarəsi sistemin tarazlığa qayıtmasını təmin edir. (4.2.2) sadə diferensial tənlikdir və onun həlli belədir:

$$f - f_0 = (f - f_0)_{t=0} e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (4.2.3)$$

τ -nun zaman vahidləri ilə ölçüldüyü buradan və (4.2.2)-dən aydındır. Əgər $t = \tau$ olsa, onda $f - f_0 = (f - f_0)_{t=0} / e$. Yəni xarici sahə kəsildikdən τ qədər vaxt keçdikdən sonra $f - f_0$ fərqi e dəfə kiçilmiş olur (sistem tarazlığa yaxınlaşmış olur). τ - **relaksasiya müddəti** adlanır. $e \approx 2,7$ olduğunu nəzərə alsaq, azacıq qəbahət etməklə deyə bilərik ki, τ xarici sahə kəsildikdən sonra sistemin tarazlığa qayıtması üçün lazım olan müddətdir (burada τ əyani fiziki mənə kəsb etmiş olur). Digər tərəfdən, sistem toqquşmalar nəticəsində tarazlığa qayıdır və bir neçə toqquşma nəticəsində elektronun sürəti artıq təsadüfi paylanmış olur. Ona görə də relaksasiya müddəti elə orta sərbəst yolu qət etmək üçün lazım olan müddət tərtibindədir (sonra görəcəyik ki, izotrop səpilmə üçün hətta ona bərabərdir). Deməli, elektronun sərbəst yolu onun sürəti və τ relaksasiya müddəti ilə təyin olunur.

İndi fərz etsək ki, τ səpilmə prosesinin birqiymətli xarakteristikasıdır və o, xarici sahədən asılı deyil (qeyd edək ki, bu şərtin ödənilməsi üçün sahə çox qüvvətli olmamalıdır), yəni sahə təsir etdikdə də səpilmə eyni cür baş verir, onda Bolsman tənliyində də səpilmə inteqralını $-\frac{f - f_0}{\tau}$ ifadəsi ilə əvəz edə bilərik. Belə olduqda qərarlaşmış hal üçün Bolsman tənliyi tamamilə sadələşmiş olur:

$$(\nabla_{\vec{r}} \nabla_{\vec{r}} f) + \frac{1}{\hbar} (\vec{F} \nabla_{\vec{r}} f) = -\frac{f(\vec{r}, \vec{k}) - f_0(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})}. \quad (4.2.4)$$

Burada biz toqquşma inteqralını belə əvəz etdik:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\infty} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_r)} W(\vec{k}, \vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] d\tau_{\nu} = -\frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}. \quad (4.2.5)$$

Yeri gəlmişkən qeyd edək ki, axırıncı yazılış τ -nu keçid ehtimalı və paylanma funksiyası vasitəsi ilə ifadə etməyə imkan verir. Doğrudan da (4.2.5)-dən

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_r)} W(\vec{k}, \vec{k}') \frac{f(\vec{k}') - f(\vec{k})}{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})} d\tau_{\nu}. \quad (4.2.6)$$

Buradan görünür ki, r dalğa vektorundan (\vec{k}) asılıdır (ümumiyyətlə koordinatdan da asılıdır, lakin bu asılılıq zəif olduğu üçün onu nəzərə almamaq olar).

Artıq kinetik tənliyi stasionar hal üçün «relaksasiya müddəti yaxınlaşmasında» həll edə bilərik. Bu məqsədlə (4.2.4) tənliyinin həllini

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(2)}(\vec{r}, \vec{k}) + \dots$$

sırası şəkildə axtaracağıq. Burada $f^{(1)}, f^{(2)} \dots$ hədləri tarazlıq paylanma funksiyasına birinci, ikinci və s. yaxınlaşmada edilən əlavələrdir. Bunun üçün nəzərə alaq ki, xarici sahə paylanma funksiyasını güclü dəyişdirmir. Onda birinci yaxınlaşmada iki hədlə kifayətlənirik:

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k}). \quad (4.2.7)$$

Deməli, Bolsman tənliyinin həlli $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})$ əlavəsini tapmağa imkan verməlidir.

İndi konkret hala baxaq. Deyək ki, yarımqeçiricidə yükdaşıyıcı elektrondur. Onda xarici elektrik (\vec{E}) və maqnit (\vec{B}) sahəsinin elektrona göstərdiyi təsir qüvvəsi:

$$\vec{F} = -e\vec{E} - e[\vec{v}\vec{B}], \quad (4.2.8)$$

burada $e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Kl}$ elektronun yüküdür və onun mənfi olduğu nəzərə alınmışdır. Sadəlik üçün fərz edək ki, enerji zonası sferik simmetriyaya malikdir və izoenergetik səthlər sfera şəklindədir:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

Bu halda elektronun sürəti:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E(k)}{\partial k} \cdot \frac{\vec{k}}{k} = u(k) \vec{k}, \quad (4.2.9)$$

$$u(k) = \frac{1}{\hbar k} \cdot \frac{\partial E(k)}{\partial k}, \quad (4.2.9 \text{ a})$$

yəni $\vec{v} \parallel \vec{k}$ -dir. İndi (4.2.7), (4.2.8)-ü (4.2.4)-də yerinə yazaq:

$$(\vec{v} \nabla_{\vec{r}} f) + \frac{2\pi e}{\hbar} \{(-\vec{E} - [\vec{v}\vec{B}])\} \cdot \nabla_{\vec{r}} f = -\frac{f^{(1)}(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})}. \quad (4.2.10)$$

$f^{(1)}$ -i hansı şəkildə axtarmağı müəyyən etmək üçün (4.2.10)-da f -in özünə f_0 yazıb, sol tərəfi sadələşdirmək kifayətdir. Bunun üçün $\nabla_{\vec{r}} f_0$ və $\nabla_{\vec{r}} f_0$ vuruqlarını hesablayaq:

$$\nabla_{\vec{r}} f_0 = \nabla_{\vec{r}} \frac{1}{e^{\frac{E-F}{k_B T}} + 1} = -\frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{E-F}{k_B T}} \left(-\nabla_{\vec{r}} F + \frac{F-E}{T} \nabla_{\vec{r}} T \right)}{\left(e^{\frac{E-F}{k_B T}} + 1 \right)^2} =$$

$$= \frac{\partial f_0}{\partial E} \left(\frac{E-F}{T} \nabla_r T - \nabla_r F \right) = \frac{\partial f_0}{\partial E} [(E-F) \nabla_r \ln T - \nabla_r F] \quad (4.2.11)$$

$$\nabla_k f_0 = \nabla_k \frac{1}{e^{\frac{E-F}{k_0 T}} + 1} = -\frac{1}{k_0 T} \frac{e^{\frac{E-F}{k_0 T}} \nabla_k F}{\left(e^{\frac{E-F}{k_0 T}} + 1 \right)^2} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \bar{v}, \quad (4.2.11 a)$$

(4.2.11) və (4.2.11a)-nı (4.2.10)-da yerinə yazıb, müəyyən sadələşdirmə apardıqdan sonra alırıq:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} (\bar{v}, (F-E) \nabla_r \ln T - \nabla_r F - e \bar{E}) = -\frac{f^0(\bar{r}, \bar{k})}{\tau(\bar{k})}. \quad (4.2.12)$$

Bu düsturu çıxararkən $(\bar{v}, [\bar{v} \bar{B}]) = 0$ (qarışıq hasilə \bar{v} vektoru iki dəfə iştirak etdiyi üçün) olduğunu nəzərə aldığımız və sadəlik üçün ∇ -nın \bar{r} və \bar{k} indekslərini yazmadıq. Yadda saxlayaq ki, T və F yalnız \bar{r} -dən, E və τ isə \bar{k} -dən asılıdır, \bar{v} (4.29)-dən görüldüyü kimi, \bar{k} -dən asılı olmaqla bərabər, həm də \bar{k} vektoru ilə eyni istiqamətdə yönəlmişdir: $\bar{v} \parallel \bar{k}$.

(4.2.12)-dən görünür ki, baxdığımız yaxınlaşmada ($f \approx f_0$) f^0 maqnit sahəsindən asılı deyil: maqnit sahəsinin təsirini nəzərə almaq üçün (4.2.10)-da $\nabla_k f$ ifadəsini növbəti yaxınlaşmada hesablamaq lazımdır. Qeyd edək ki, buradan başqa bir nəticə çıxır: elektrik sahəsinin paylanma funksiyasının dəyişməsinə verdiyi pay maqnit sahəsininkindən daha çoxdur. (4.2.12)-dən görünür ki, f^0 -i belə seçmək lazımdır:

$$f^0(\bar{r}, \bar{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial E} (\bar{\chi}(\bar{r}, \bar{k}) \bar{k}), \quad (4.2.13)$$

burada $\bar{\chi}$ vektoru \bar{r} və \bar{k} -nin funksiyasıdır və onu tapmaq tələb olunur. (4.2.13)-dan istifadə etsək:

$$\nabla_k f = \nabla_k \left[f_0 - \frac{\partial f_0}{\partial E} (\bar{\chi}, \bar{k}) \right] = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \bar{v} - \left(\nabla_k \frac{\partial f_0}{\partial E} \right) (\bar{\chi}, \bar{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_k (\bar{\chi}, \bar{k}), \quad (4.2.14)$$

$$\nabla_k \frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial^2 f_0}{\partial E^2} \nabla_k E = \frac{\partial^2 f_0}{\partial E^2} \hbar \bar{v}. \quad (4.2.15)$$

Deməli, (4.2.14)-ın ikinci həddini də (4.2.10)-da yerinə yazdıqda \bar{v} -nin $[\bar{v} \bar{B}]$ -yə qarışıq hasilə sıfır verir. (4.2.14)-ın üçüncü həddinin verdiyi payı tapmaq üçün əvvəlcə $\nabla_k (\bar{\chi} \bar{k})$ - vektorunun komponentlərini tapmaq. k_x oxu üzrə yönəlmiş komponent:

$$\frac{\partial}{\partial k_x} (\bar{\chi} \bar{k}) = \frac{d}{d k_x} (\chi_x k_x + \chi_y k_y + \chi_z k_z) = \chi_x + \left(k_x \frac{\partial \chi_x}{\partial k_x} + k_y \frac{\partial \chi_y}{\partial k_x} + k_z \frac{\partial \chi_z}{\partial k_x} \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= \chi_x + \left(k_x \frac{\partial \chi_x}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_x} + k_y \frac{\partial \chi_y}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_x} + k_z \frac{\partial \chi_z}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial k_x} \right) = \\
&= \chi_x + \left(k_x \frac{\partial \chi_x}{\partial E} + k_y \frac{\partial \chi_y}{\partial E} + k_z \frac{\partial \chi_z}{\partial E} \right) l \cdot \hbar v_x.
\end{aligned} \tag{4.2.16}$$

Diger komponentləri də eyni qayda ilə tapa bilərik. (4.2.16)-dən aydın görünür ki,

$$\nabla_x(\vec{\chi} \vec{k}) = \vec{\chi} + \left(k_x \frac{\partial \chi_x}{\partial E} + k_y \frac{\partial \chi_y}{\partial E} + k_z \frac{\partial \chi_z}{\partial E} \right) l \cdot \hbar v. \tag{4.2.17}$$

Deməli, burada da sağ tərəfdə ikinci həddə \vec{v} iştirak edir və onun $[\vec{v} \vec{B}]$ -yə skalyar hasilini sıfır verir. (4.2.17)-ü yadda saxlayıb, (4.2.14)-ü və (4.2.11)-ni (4.2.10)-nın sol, (4.2.13)-ü isə sağ tərəfində yerinə yazsaq, alarıq:

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ (F - E) \nabla \ln T - \nabla F - e \vec{E} - \frac{e}{\hbar} [\vec{B} \vec{\chi}] \right\} \vec{v} = \frac{l \partial f_0}{\tau \partial E} \frac{1}{u(k)} (\vec{\chi} \vec{v}). \tag{4.2.18}$$

Sol tərəfdə $([\vec{v} \vec{B}] \vec{\chi}) = (\vec{v} [B \vec{\chi}])$ qarışıq hasilin xassəsindən istifadə eddik, sağ tərəfdə isə $\vec{k} = \frac{1}{u(k)} \vec{v}$ yazdıq. (4.2.18)-in sol və sağ tərəflərinin müqayisəsindən aydın olur ki,

$$\vec{\chi} = u(k) \left\{ (F - E) \nabla \ln T - \nabla F - e \vec{E} - \frac{e}{\hbar} [\vec{B} \vec{\chi}] \right\}. \tag{4.2.19}$$

Tətbiq olunan elektrik sahəsinin elektrostatik potensialını $\varphi(\vec{r})$ -lə işarə etsək, \vec{E} -nin əvəzinə $\vec{E} = -\nabla \varphi$ yazsaq bilərik. $\vec{\chi}$ -ni tapmaq üçün belə əvəzləmə aparırıq:

$$u(k) \left\{ (F - E) \nabla \ln T - \nabla(F - e\varphi) \right\} = \vec{L}; \quad -\frac{\tau u(k) e}{\hbar} \vec{B} = \vec{B}'. \tag{4.2.19a}$$

Onda (4.2.19)-un əvəzinə sadə ifadə almışı alırıq:

$$\vec{\chi} = \vec{L} + [\vec{B}' \vec{\chi}]. \tag{4.2.20}$$

Bu ifadənin hər iki tərəfini soldan \vec{B}' -a skalyar vursaq, $(\vec{B}' [\vec{B}' \vec{\chi}]) = 0$ olduğu üçün alırıq:

$$(\vec{B}' \vec{\chi}) = (\vec{B}' \vec{L}). \tag{4.2.21}$$

İndi (4.2.20)-ni soldan \vec{B}' -a vektor vuraq:

$$[\vec{B}' \vec{\chi}] = [\vec{B}' \vec{L}] + [\vec{B}' [\vec{B}' \vec{\chi}]]. \tag{4.2.22}$$

İkiqat vektor hasilin xassəsindən istifadə edək¹:

$$[\vec{B}' [\vec{B}' \vec{\chi}]] = \vec{B}' (\vec{B}' \vec{\chi}) - \vec{\chi} B'^2. \tag{4.2.23}$$

(4.2.20)-da (4.2.21), (4.2.22) və (4.2.23)-ü nəzərə alsaq:

¹ $[\vec{a}(\vec{b}\vec{c})] = \vec{b}(\vec{a}\vec{c}) - \vec{c}(\vec{a}\vec{b})$

$$\bar{\chi} = \frac{\bar{L} + [\bar{B}' \bar{L}] + (\bar{B}' \bar{L}) \bar{B}'}{1 + \bar{B}'^2} \quad (4.2.24)$$

f° -ni tapmaq üçün $\bar{\chi}$ -nin ifadəsini (4.2.13)-da yerinə yazmaq lazımdır.

Beləliklə, qərarlaşmış hal üçün kinetik tənliyi izoenergetik səthləri sfera şəklində olan kristalla elektron üçün həll etdik. Müxtəlif adlı yükdaşıyıcıları bir-birindən fərqləndirmək üçün elektron və deşiyə aid olan parametrləri uyğun olaraq ayağında n və p ilə işarə edəcəyik. İndi $\bar{\chi}$ funksiyasını elektron üçün açıq şəkildə yazaq:

$$\begin{aligned} \bar{\chi}_n = & -\tau_n u_n \frac{(E-T)\nabla \ln T + \nabla(F-e\varphi)}{1 + \left(\frac{e\tau_n u_n}{\hbar}\right)^2 B^2} \frac{e\tau_n u_n}{\hbar} \left[\bar{B}' \{ (E-F)\nabla \ln T + \nabla(F-e\varphi) \} \right] + \\ & + \left(\frac{e\tau_n u_n}{\hbar} \right)^2 \frac{ \{ (E-F)\nabla \ln T + \nabla(F-e\varphi) \} \bar{B} \bar{B}'}{1 + \left(\frac{e\tau_n u_n}{\hbar}\right)^2 B^2}. \end{aligned} \quad (4.2.25)$$

Aydındır ki, kinetik tənliyi deşik üçün də həll edə bilərik. İzoenergetik səthlər küre olan sadə hal üçün deşiyin enerjisini E' dalğa vektorunu \bar{k}' kimyəvi potensialını F' ilə işarə etsək:

$$E' = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_p}, \quad F' = -\Delta E_g - F, \quad (4.2.26)$$

burada ΔE_g - qadağan olunmuş zonanın enidir və enerji keçiricilik zonasının dibindən hesablanır. Deşiyin yükünün müsbət olduğunu da nəzərə alsaq, onun üçün (4.2.25)-ə uyğun alarıq:

$$\begin{aligned} \bar{\chi}_p = & -\tau_p u_p \frac{(E' + \Delta E_g + F) \cdot \nabla \ln T - \nabla(F - e\varphi)}{1 + \left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar}\right)^2 B^2} + \\ & + \frac{e\tau_p u_p}{\hbar} \left[\frac{\bar{B}' \{ (E' + \Delta E_g + F) \cdot \nabla \ln T - \nabla(F - e\varphi) \}}{1 + \left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar}\right)^2 B^2} \right] + \left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar} \right)^2 \times \\ & \times \frac{ \{ (E' + \Delta E_g + F) \cdot \nabla \ln T - \nabla(F - e\varphi) \} \bar{B} \bar{B}'}{1 + \left(\frac{e\tau_p u_p}{\hbar}\right)^2 B^2}. \end{aligned} \quad (4.2.26 a)$$

$\bar{\chi}_{n,p}$ üçün aldığımız ifadələr mürəkkəbdir, lakin xüsusi hallarda (məsələn, $\bar{B} = 0$ və ya $\nabla T = 0$ və s.) onlar sadələşirlər və hesablamalar da asanlaşır. Biz ayrı-ayrı konkret halları sonra araşdıracağıq. İndi isə qeyri-tarazlıq halında elektronların yaratdığı elektrik cərəyanının və enerji selinin sıxlığına baxaq.

§4.3. Elektrik cərəyanının və enerji selinin sıxlığı

Termodinamik tarazlıq halında, aydındır ki, kristalda nə elektrik cərəyanı, nə də istiqamətlənmiş enerji seli mövcuddur. Qeyri-tarazlıq halında (xarici təsir etdikdə) isə paylanma funksiyasının simmetriyası pozulur və bu da yükdaşıyıcıların istiqamətlənmiş hərəkətinə (yükün və enerjinin köçürülməsinə) səbəb olur. Bu hərəkəti xarakterizə etmək üçün əvvəlcə cərəyan sıxlığını hesablayaq. Yada salaq ki, vahid həcmli kristal üçün Brillüen zonasının $d\tau_k$ həcm elementində $\frac{d\tau_k}{8\pi^3}$ kvant halı var. Bu

hallarda olan elektronların sayı:

$$dn = 2 \frac{d\tau_k}{8\pi^3} f(\vec{r}, \vec{k}), \quad (4.3.1)$$

Burada 2 vuruğu spin cırlaşmasının nəzərə alındığını göstərir, f isə qeyri-tarazlıq paylanma funksiyasıdır. Elektronun kvant-mexaniki orta sürətinin $\bar{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}}$ olduğunu nəzərə alsaq, $d\tau_k$ həcm elementində olan elektronların yaratdığı cərəyan sıxlığını (daha doğrusu, cərəyan sıxlığı elementini) tapmaq üçün dn -i elektronun yükünə (e) və \bar{v} sürətinə vurmaq lazımdır (bu kəmiyyət vahid zamanda \bar{v} -yə perpendikulyar olan vahid səthdən keçən yükün miqdarı olacaq):

$$d\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} f(\vec{r}, \vec{k}) \bar{v} d\tau_k. \quad (4.3.2)$$

Sərbəst elektronların hamısının yaratdığı cərəyan sıxlığını tapmaq üçün (4.3.2) ifadəsini bütün Brillüen zonası üzrə inteqrallamaq lazımdır:

$$\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(v_s)} f(\vec{r}, \vec{k}) \bar{v} d\tau_k. \quad (4.3.3)$$

İndi f -in qiymətini yerinə yazıb, inteqralı açmaq lazımdır:

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(v_s)} \bar{v} f_0 d\tau_k - \frac{e}{4\pi^3} \int_{(v_s)} \bar{v} f^{\circ} d\tau_k = \\ &= -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(v_s)} \left[-\frac{\partial f_0}{\partial E} u_n(k) (\vec{\chi}_n \vec{k}) \vec{k} \right] d\tau_k. \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

Burada f_0 iştirak edən inteqral sıfıra bərabərdir. Çünki həmin hədd tarazlıq halına uyğun gələn cərəyanı ifadə edir. Bu riyazi cəhətdən də aydındır: $f_0 \vec{k}$ -ya görə cüt, $\bar{v} f_0$ isə tək funksiyadır. Məlumdur ki, tək funksiyanın simmetrik sərhədlərə görə inteqralı sıfırdır.

Enerji seli sıxlığını (\vec{W}) da eyni qayda ilə tapa bilərik. Hər bir yükdaşıyıcının enerjisi olduğu üçün onların istiqamətlənmiş hərəkəti

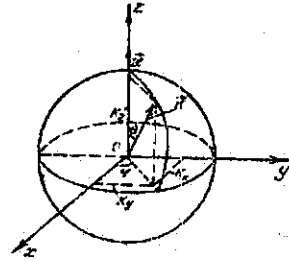
zamani \bar{v} -yə perpendikulyar istiqamətdə vahid səthdən vahid zamanda keçən enerji belə təyin olunacaqdır:

$$\begin{aligned}\bar{W} &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_0)} E f(\bar{r}, \bar{k}) \bar{v} d\tau_k = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_0)} E f^0 \bar{v} d\tau_k = \\ &= -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_0)} E \frac{\partial f_0}{\partial E} u_n(k) (\bar{\chi}_n \bar{k}) \bar{k} d\tau_k.\end{aligned}\quad (4.3.5)$$

Əvvəl qeyd etdiyimiz səbəbə görə f_0 iştirak edən inteqral sıfırdır (yada salaq ki, E -də k -nın cüt funksiyasıdır). (4.3.4) və (4.3.5)-dakı inteqralların açılmasını asanlaşdırmaq üçün sferik koordinat sisteminə keçək və polyar oxu (z) $\bar{\chi}$ vektoru istiqamətdə seçək ($z \parallel \bar{\chi}$).

Onda $(\bar{\chi}_n \bar{k})$ skalyar hasilı:

$$(\bar{\chi}_n \bar{k}) = \chi_n k \cos \theta, \quad (4.3.6)$$



Şəkil 4.3. Fəza fəzasında sferik izoenergetik səth

burada θ $\bar{\chi}$ və \bar{k} vektorları arasında qalan bucaqdır (şəkil 4.3). \bar{k} -ni komponentləri vasitəsilə yazaq:

$$\bar{k} = k \bar{j}_0 + k_x \bar{j}_x + k_y \bar{j}_y. \quad (4.3.7)$$

$\bar{i}_0, \bar{j}_0, \bar{k}_0$ -uyğun olaraq x, y, z oxları üzrə yönəlmiş vahid vektorlardır. Şəkil 4.3-dən aydın olduğu kimi:

$$\begin{aligned}k_x &= k \sin \theta \cos \varphi, \\ k_y &= k \sin \theta \sin \varphi, \\ k_z &= k \cos \theta.\end{aligned}\quad (4.3.7a)$$

Baxdığımız halda izoenergetik səthlər sfera olduğu üçün həcm elementi $d\tau_k$ -ni belə yazı bilərik:

$$d\tau_k = dS_k dk. \quad (4.3.8)$$

dS_k - \bar{k} vektoru ilə xarakterizə olunan izoenergetik səthdə (radiusu \bar{k} -ya bərabər olan kürə səthində) səth elementidir. Onu fəza cisim bucağı elementi vasitəsilə ifadə edə bilərik:

$$dS_k = k^2 d\Omega = k^2 \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (4.3.9)$$

Burada məlum $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ düsturundan istifadə etdik. (4.3.6) və (4.3.9) ifadələrini (4.3.4)-də nəzərə alsaq, cərəyan sıxlığının ifadəsini belə şəkllə salmış olarıq:

$$\begin{aligned}\bar{j}_n &= -\frac{e}{4\pi^3} \int_{(v_0)} \left[-\frac{\partial f_0}{\partial E} u_n(k) \right] \chi_n \{ \bar{i}_0 \sin \theta \cos \varphi + \bar{j}_0 \sin \theta \sin \varphi + \bar{k}_0 \cos \theta \} \times \\ &\times \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi k^4 dk.\end{aligned}\quad (4.3.10)$$

Birinci və ikinci həddin inteqralı sıfıra bərabərdir, çünki φ üzrə 0-dan 2π -yə qədər inteqral sıfırdır. Üçüncü həddə isə

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = -2\pi \cdot \frac{1}{3} \cdot \cos^3 \theta \Big|_0^{\pi} = \frac{4\pi}{3}. \quad (4.3.11)$$

$\vec{\chi}_n$ vektoru ilə \vec{k} , vahid vektorunun istiqamətləri eyni olduğu üçün $\chi_n \vec{k}_0 = \vec{\chi}_n$. Onda:

$$\vec{j}_n = -\frac{e}{3\pi^2} \int_0^{\infty} \left[-\frac{\partial f_0}{\partial E} u_n(k) \right] \vec{\chi}_n k^4 dk, \quad (4.3.12)$$

burada k üzrə inteqrallama 0-dan ∞ -a qədər (sferik koordinat sistemində radius-vektorun dəyişmə intervalı) götürülür.

Enerji selinin sıxlığı üçün isə (4.3.5)-dan eyni qayda ilə belə ifadə alırıq:

$$\vec{W}_n = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{\infty} E \left[-\frac{\partial f_0}{\partial E} u_n(k) \right] \vec{\chi}_n k^4 dk. \quad (4.3.13)$$

Deşik üçün eyni ifadələri yazmaq heç bir çətinlik törətmir. Bundan ötrü $-e$ -ni e ilə əvəz etmək və uyğun $E, f_0, u, \vec{\chi}$ kəmiyyətləri deşik üçün götürmək lazımdır.

İzoenergetik səthlər küre şəklində olduqda $u = \frac{1}{\hbar k} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{\hbar}{m^*}$ olur.

Bunu nəzərə alıb cırlaşma olmayan hal üçün \vec{j}_n -i hesablayaq. Bu halda:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial f_0}{\partial E} &= -\frac{\partial}{\partial E} e^{-\frac{E-F}{k_0 T}} = \frac{1}{k_0 T} e^{-\frac{E-F}{k_0 T}} = \\ &= \frac{1}{k_0 T} e^{\frac{F}{k_0 T}} \cdot e^{-\frac{E}{k_0 T}} = \frac{\hbar^3 n}{2(2\pi m_n^*)^3 (k_0 T)^5} e^{-\frac{E}{k_0 T}}. \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

Bu düsturu çıxararkən biz $e^{-\frac{F}{k_0 T}}$ -ni (4.3.5) düsturundan (bax: III fəsil) tapıb yerinə yazdıq:

$$n = 2 \left(\frac{m_n^* k_0 T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 e^{\frac{F}{k_0 T}}. \quad (4.3.15)$$

k -nı enerji E vasitəsilə ifadə edək.

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_n^* E}, \quad dk = \frac{1}{\hbar} \frac{\sqrt{2m_n^*}}{2} E^{-\frac{1}{2}} dE. \quad (4.3.16)$$

Sonra ölçüsüz inteqrallama dəyişsinə keçək:

$$\frac{E}{k_0 T} = x, \quad dE = k_0 T dx. \quad (4.3.17)$$

(4.3.12)-də (4.3.14)-i nəzərə alsaq:

$$\bar{j}_n = -\frac{8\pi n}{3\sqrt{\pi h}} \int_0^{\infty} \bar{\chi}_n e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx. \quad (4.3.18)$$

Düsturu daha əlverişli şəkə salmaq üçün belə əvəzləmə aparaq:

$$\bar{\chi}_n = -\frac{e\hbar}{m_n} \bar{\chi}_n^*, \quad (4.3.19)$$

$$\bar{L}_n = \frac{E-F}{e} \nabla \ln T + \nabla \left(\frac{F}{e} - \varphi \right), \quad (4.3.20)$$

$$\gamma_n = \frac{e}{m_n}, \quad (4.3.21)$$

onda

$$\bar{\chi}_n^* = \frac{\tau_n \bar{L}_n + \gamma_n \tau_n^2 [\bar{B} \bar{L}_n] + \gamma_n^2 \tau_n^3 [\bar{B} \bar{L}_n] \bar{B}}{1 + (\gamma_n \tau_n \bar{B})^2}. \quad (4.3.22)$$

İndi \bar{j}_n^* üçün alarıq:

$$\bar{j}_n^* = \frac{ne^2}{m_n^*} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \bar{\chi}_n^* e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx. \quad (4.3.23)$$

$\bar{\chi}_n^*$ -kəmiyyətinin orta qiymətini belə işarə edək:

$$\langle \bar{\chi}_n^* \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \bar{\chi}_n^* e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx. \quad (4.3.24)$$

Orta qiymətin bu cür hesablanmasının doğruluğunu hər hansı sabit (enerjidən asılı olmayan) $\bar{g} = const$ kəmiyyətinin orta qiymətini tapmaqla yoxlaya bilərik (sabit kəmiyyətin orta qiyməti elə özünə bərabər olmalıdır). Doğrudan da:

$$\begin{aligned} \langle \bar{g} \rangle &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \bar{g} e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \bar{g} \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx = \\ &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \bar{g} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \bar{g} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi} = \bar{g}, \end{aligned} \quad (4.3.25)$$

burada $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx$ Eylerin məlum qamma funksiyasıdır və inteqralın açılmasında biz onun xassəsindən istifadə etdik.

Orta qiymət anlayışından istifadə etsək, \bar{j}_n -in ifadəsini sadə şəkildə yazarıq:

$$\bar{j}_n = \frac{ne^2}{m_n^*} \langle \bar{\chi}_n^* \rangle. \quad (4.3.26)$$

Deşik üçün uyğun əməliyyatlar aparmaqla deşiklərin yaratdığı cərəyanın ifadəsini asanlıqla ala bilərik:

$$j_p = \frac{pe^2}{m_p} \langle \bar{\chi}_p^* \rangle. \quad (4.3.27)$$

Burada uyğun kəmiyyətlər belə təyin olunur:

$$\bar{\chi}_p = \frac{\hbar e}{m_p} \bar{\chi}_p^*, \quad (4.3.27 \text{ a})$$

$$\bar{\chi}_p^* = \frac{\tau_p \bar{L}_p - \gamma_p \tau_p^2 [\bar{B} \bar{L}_p] + \gamma_p^2 \tau_p^3 [\bar{B} \bar{L}_p] \bar{B}}{1 + (\gamma_p \tau_p \bar{B})^2}, \quad (4.3.27 \text{ b})$$

$$\gamma_p = \frac{e}{m_p}, \quad (4.3.27 \text{ v})$$

$$\bar{L}_p = -\frac{E' + \Delta E_a + F}{e} \nabla \ln T + \nabla \left(\frac{F}{e} - \varphi \right). \quad (4.3.28)$$

Əgər yarımkəçiricidə eyni zamanda iki növ yükdaşıyıcı (elektron və deşik) mövcuddursa, onda onların yaratdığı ümumi cərəyan sıxlığı:

$$\bar{j} = \bar{j}_n + \bar{j}_p = \frac{ne^2}{m_n} \langle \bar{\chi}_n^* \rangle + \frac{pe^2}{m_p} \langle \bar{\chi}_p^* \rangle. \quad (4.3.29)$$

Eyni əvəzetmə və işarələri saxlasaq, enerji selinin sıxlığı üçün alırıq:

$$\bar{W}_n = \frac{n}{\hbar} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int E \bar{\chi}_n e^{-x^2} x^2 dx = \frac{n}{\hbar} \langle E \bar{\chi}_n \rangle. \quad (4.3.30)$$

Kinetik hadisələrin araşdırılması üzərində biz müfəssəl dayanacağıq. Hələlik burada misal olaraq sadə zona quruluşuna malik olan yarımkəçirici üçün elektrik keçiriciliyinin ifadəsini alaıq.

§ 4.4. Sadə zona quruluşlu yarımkəçiricinin elektrik keçiriciliyi

Cırlaşma olmayan hal üçün izoenergetik səthləri sfera olan bircins ($\nabla F = 0$) yarımkəçiricinin keçiriciliyini təyin edək. Bunun üçün fərz edək ki, kristala xarici maqnit sahəsi təsir etmir ($\bar{B} = 0$) və temperatur qradienti sıfırdır ($\nabla T = 0$). Aydınır ki, sərbəst yükdaşıyıcıları olan kristalda elektrik keçiriciliyinin baş verməsi üçün təkə xarici elektrik sahəsinin təsir etməsi kifayətdir. Qeyd olunan şərtləri nəzərə alsaq, (4.3.3)-dən:

$$\bar{\chi}_n^* = \tau_n \bar{L}_n = \tau_n (-\nabla \varphi) = \tau_n \bar{E}, \quad (4.4.1)$$

burada \bar{E} -elektrik sahəsinin intensivliyidir. Onda (4.3.26)-dən:

$$\bar{j}_n = \frac{ne^2}{m_n} \langle \tau_n \rangle \bar{E} = \sigma_n \bar{E}. \quad (4.4.2)$$

Beləliklə, Om qanununu almış olduq. σ_n – elektrik keçiriciliyidir, qiyməti isə (4.4.2)-dən görüldüyü kimi, belə təyin olunur:

$$\sigma_n = \frac{ne^2}{m_n} < \tau_n >. \quad (4.4.3)$$

Buradan aydın olur ki, keçiricilik relaksasiya müddətinin enerjiyə görə hesablanmış orta qiyməti ilə təyin olunur. σ_n -nin dreyf yürüklüyü (μ) vasitəsi ilə məlum ifadəsindən istifadə etsək:

$$\sigma_n = ne\mu_n. \quad (4.4.3 \text{ a})$$

(4.4.3) və (4.4.3 a)-nın müqayisəsindən alarıq:

$$\mu_n = \frac{e}{m_n} < \tau_n >. \quad (4.4.4)$$

Deməli, dreyf yürüklüyü bütün yükdaşıyıcıların enerjisinə görə ortalanmış (relaksasiya müddəti vasitəsi ilə) bir kəmiyyətdir. Xüsusi halda τ enerjiden asılı olmasa:

$$\mu_n = \frac{e\tau_n}{m_n}. \quad (4.4.4 \text{ a})$$

Deşiklərin yaratdığı cərəyan üçün də eyni cür ifadələri ala bilərik. Onda iki növ yükdaşıyıcısı olan yarımkəçirici üçün:

$$\vec{j} = e(n\mu_n + p\mu_p)\vec{E}. \quad (4.4.5)$$

və

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p). \quad (4.4.6)$$

σ -nin temperaturdan asılılığını bilmək üçün n, p, μ_n və μ_p -nin temperaturdan asılılığını bilməliyik. Elektron və deşiyin konsentrasiyasının temperaturdan asılılığı bizə artıq məlumdur (bax: III fəsil). Yürüklüyün ifadəsini açıq şəkildə almaq (və eləcə də onun temperaturdan asılılığını bilmək) üçün, (4.4.4)-dən görüldüyü kimi, relaksasiya müddətinin enerjiyə görə ortalaşdırılmış qiymətini ($\langle \tau \rangle$) bilmək tələb olunur. Bunun üçün isə τ -nün yükdaşıyıcıların enerjisindən necə asılı olduğunu tapmaq lazımdır. τ -nün E -dən asılılığı səpilmə mexanizmindən asılıdır.

§4.5. Yarımkəçiricilərdə istilikkeçirmə. İstilikkeçirmənin müxtəlif mexanizmləri

Əgər kristalda ∇T temperatur qradienti yaradılsa, onda bu kristalda temperatur qradientinin əksinə yönələn

$$\vec{W} = -\chi \nabla T \quad (4.5.1)$$

istilik seli yaranır. Burada $\chi = |\vec{W}|/|\nabla T|$ kəmiyyəti istilikkeçirmə əmsalı adlanır. Təyininə görə görüldüyü kimi o, ədədi qiymətcə uclarında vahid temperatur qradienti yaradılmış nümunənin vahid en kəsiyindən vahid

zamanda keçən enerji miqdarına bərabərdir. Beynəlxalq vahidlər sistemində istilikkeçirmə əmsalı χ $\text{Coul}/(\text{san} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K}/\text{m}) = \text{Vt}/(\text{m} \cdot \text{K})$ -lə ölçülür.

Yarımkəçiricilərdə ümumi istilikkeçirmə (χ) fononlarla (kristal qəfəsin istilikkeçirməsi χ_q), sərbəst yükdaşıyıcılarla: elektron və ya deşiklərlə (elektron istilikkeçiriciliyi χ_e) fononlarla (χ_f) məxsusi keçiricilik oblastında cütlərlə: elektron deşik (bipolyar istilik keçiriciliyi χ_b) və həmçinin eksiton (χ_{ex}) və spin dalğaları (χ_{spin}) ilə istilikkeçirmədən ibarət olur:

$$\chi = \chi_q + \chi_e + \chi_f + \chi_b + \chi_{ex} + \chi_{spin} \quad (4.5.2)$$

Bu və ya digər mexanizmin nisbi rolu seçilmiş temperatur oblastından, maddenin zona quruluşundan, tərkibindəki aşqarların miqdarı və paylanmasıdan və s. asılıdır.

İstilikkeçirmənin tədqiqi materialın bir sıra xassələri barədə qiymətli məlumat verir. Kristal qəfəsin istilikkeçirməsini tədqiq edərək ondakı bütün mümkün olan defektlər: yüklü və neytral aşqarlar, vakansiyalar, dislokasiyalar, elastiki gərginliklər və s. barədə məlumat əldə etmək olar. Elektron və bipolyar istilikkeçirmədən yükdaşıyıcıların səpilmə mexanizmləri, qadağan zonasının eni, onun temperatur gedişi və s. barədə mühakimə aparmaq olar. Cədvəl 1-də ümumi istilikkeçirmənin müxtəlif toplananlarına əsasən materialın xassələri haqqındakı məlumatlar toplusu barədə sxem verilmişdir.

Ümumi istilikkeçirmə həmçinin böyük tətbiqi əhəmiyyətə malikdir. Termoelektrik soyuducuları və generatorlarının faydalı iş əmsalının təyininə, diod, tranzistor və lazerlərin iş rejimlərinin hesabında ümumi istilikkeçirmədən birbaşa istifadə olunur.

İstilikkeçirmə hadisələrində əsas rolu iki toplanan: χ_q - fonon və χ_e - sərbəst yükdaşıyıcılarla istilikkeçirmə oynayır.

Əvvəlcə sərbəst yükdaşıyıcılarla istilikkeçirməni nəzərdən keçirək. Qeyd etdiyimiz kimi, tarazlıq paylanma funksiyasına əlavə olunan f_i funksiyası kinetik əmsalları, o cümlədən istilikkeçirməyə müvafiq əmsalları da hesablamağa imkan verir. Paylanma funksiyasının dəyişməsi ilə meydana çıxan enerji seli

$$\vec{W} = \frac{1}{4\pi^3} \int f_i E \vec{v}(\vec{k}) d\tau, \quad (4.5.3)$$

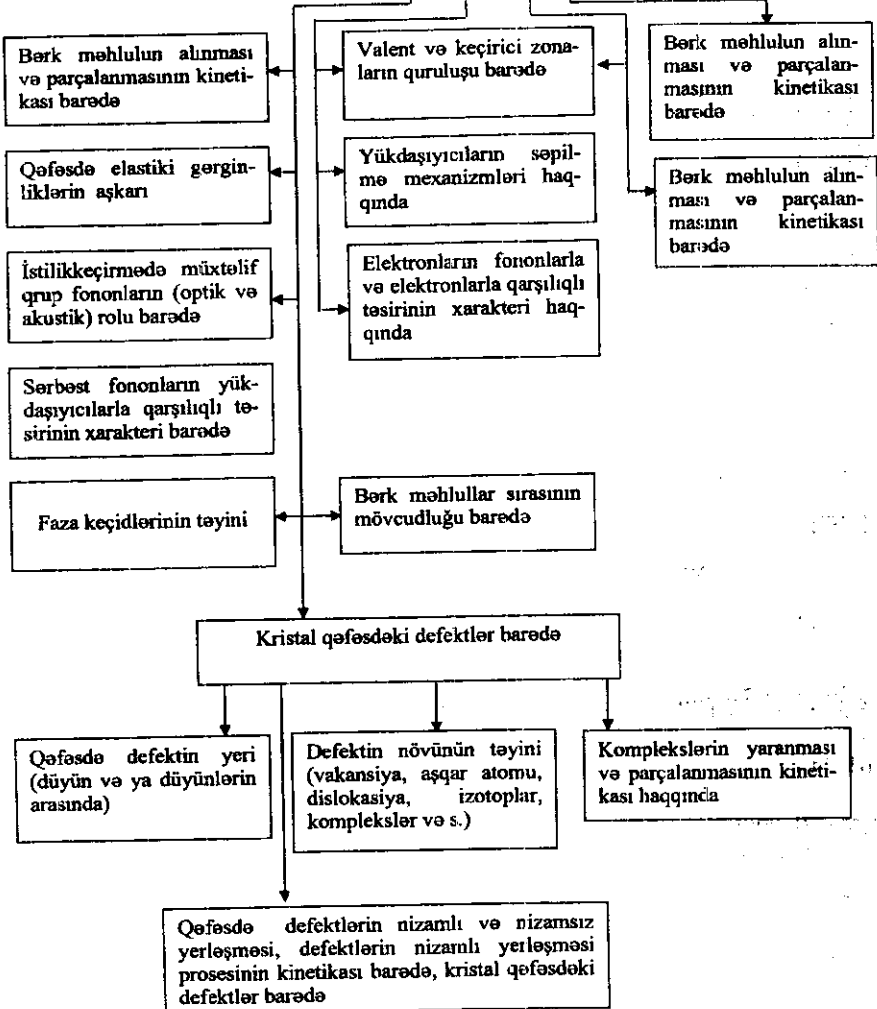
kimi ifadə oluna bilər, burada E -hərəkət edən yükdaşıyıcıların enerjisidir.

f_i -funksiyasının $\vec{\chi}(E)$ funksiyası ilə ifadəsindən \vec{k} və \vec{r} -fəzada $(\nabla_r f)$ və $(\nabla_k f)$ qradientlərini hesablayaq:

Cədvəl 4.1.

**İstilikkeçirmənin tədqiqindən bərk cismin parametrləri barədə
alınan bilən məlumatlar**

$$\chi = \chi_q + \chi_e + \chi_b + \chi_f$$



$$\nabla_{\epsilon} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \vec{v}; \quad \nabla_{\epsilon} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[(E - F) \frac{\nabla T}{T} - \nabla F \right]$$

paylanma funksiyasına qeyri-tarazlığa müvafiq əlavələrin ifadələrini aşağıdakı kimi ala bilərik:

$$f_1 = \tau [(F - E) \nabla T / T - \nabla(F - e\phi)] \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} \quad (4.5.4)$$

Burada nəzərdə tutulur ki, xarici qüvvə yalnız elektrik sahəsi tərəfindən meydana çıxır:

$$\vec{F}_e = -e\vec{E} = e\nabla\phi \quad (4.5.5)$$

(4.5.5) ifadəsindən alınır ki, paylanma funksiyasının qeyri-tarazlıq hissəsi ∇T -temperatur qradienti, $\nabla(e\phi)$ elektrik sahəsinin potensialı və ∇F - Fermi səviyyəsindən asılıdır. Aydındır ki, bu səbəbdən f funksiyasından asılı olan cərəyanı və enerji seli də həmin parametrlərin xətti funksiyaları olacaqlar:

$$\vec{j} = L_{EE} \vec{E}' + L_{ET} \nabla T, \quad (4.5.6)$$

$$\vec{W} = L_{TE} \vec{E}' + L_{TT} \nabla T, \quad (4.5.7)$$

burada L_{EE}, L_{ET}, L_{TE} və L_{TT} - kinetik əmsallar, \vec{E}' isə xarici elektrik sahəsinin və Fermi səviyyəsinin dəyişməsinə nəzərə alan hər hansı effektiv sahədir:

$$\vec{E}' = \vec{E} - \frac{\nabla F}{e} \quad (4.5.8)$$

L əmsallarının fiziki mənası konkret daşınma hadisələrinə baxdıqda aydın olur. Məsələn, əgər elektrik cərəyanı sabit temperaturda nəzərdən keçirilirsə, ($\nabla T \approx 0$), onda $L_{EE} = \sigma$, yəni bu əmsal elektrik keçiriciliyi əmsalı kimi tənlüyə daxil olur.

İstilikkeçirmə adətən elektrik cərəyanı olmayan halda ($\vec{j} = 0$) baxılır. Onda tənlüyündən

$$\vec{E}' = -\frac{L_{ET}}{L_{EE}} \nabla T \quad (4.5.9)$$

alırıq. (4.5.7) tənlüyündə sahənin effektiv qiymətini (4.5.8) ifadəsini nəzərə alsaq, temperatur qradienti ilə enerji seli arasında əlaqəni müəyyənləşdirək:

$$\vec{W} = (-L_{TE} L_{ET} / L_{EE} + L_{TT}) \nabla T \quad (4.5.10)$$

(4.5.10) və (4.5.1) ifadələrinin müqayisəsindən xüsusi istilikkeçirmə əmsalını tapa bilərik:

$$\chi_e = -(L_{TT} - L_{TE} L_{ET} / L_{EE}) \quad (4.5.11)$$

Bu düsturdan göründüyü kimi, istiqamətlənmiş istilik seli, yükdaşıyıcıların köçürülməsi ilə əlaqədar olduğundan, nümunənin uzunluğu boyu hər hansı elektrik sahəsi yaranır (4.5.9) Nəticədə elektrik sahəsi istilik selini müəyyən qədər azaldır və istilikkeçirmənin χ_e -elektron toplananı yalnız L_{rr} -yə bərabər olmayıb, (4.5.11) ifadəsi ilə müəyyən olunur. Kinetik əmsalların daha ciddi hesablamalarında elektron istilikkeçirməsi üçün $\chi_e = \pi^3 k_0 T \sigma / (3e^2)$ ifadəsi alınır ki, bu da asanlıqla Videman-Frans qanununa gətirib çıxarır:

$$\frac{\chi_e}{\sigma T} = \frac{\pi^2 k_0^2}{3e^2} = L \quad (4.5.12)$$

burada L - Lorens ədədi metallar üçün temperatur və səpilmə mexanizmlərindən asılı olmayan sabitdir.

Videman-Frans qanununun fiziki mənasını aşağıdakı sadə mülahizədən başa düşmək olar. Elektrik keçiriciliyi prosesində hər bir elektron elektrik sahəsinin təsiri altında öz e yükünü daşıyır. Vahid sahəyə nəzərən cərəyan şiddəti e^2 ilə mütənasibdir. İstilikkeçirmə prosesində ∇T temperatur qradiyentinin təsiri altında hər bir elektron $k_0 T$ qədər enerji daşıyır. Vahid temperatur qradiyentinə nəzərən istilik seli $k_0 T$ kəmiyyəti ilə mütənasibdir. Ona görə də bu iki kinetik əmsalın nisbəti $k_0^2 T / e^2$ tərtibində olmalıdır. $\pi^2 / 3$ vuruğu yalnız Fermi səviyyəsi yaxınlığındakı elektronları nəzərə aldığımız üçün meydana çıxır. Amma yarımkəçiricilərdə Lorens ədədi üçün başqa ifadə də almaq olar. Əgər sərbəst qaçış yolunun uzunluğunun səpilmədə enerjiden asılılığını $\lambda \approx E^r$ kimi nəzərə alsaq, parabolik formalı izoenergetik səthlər halında elektron keçiriciliyi üçün

$$\chi_e = \frac{16\pi m_{\text{eff}}^3 \lambda k_0}{3h^3} (k_0 T)^{r+2} \left[(r+3) F_{r+2} - \frac{(r+2)^2}{(r+1)} \frac{F_{r+1}^2}{F_r} \right] \quad (4.5.13)$$

ifadəsini alırıq. Burada $F - r$ -dən asılı olaraq uyğun Fermi inteqrallarıdır. Onda Videman-Frans qanunu

$$\frac{\chi_e}{\sigma T} = A \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 L \quad (4.5.14)$$

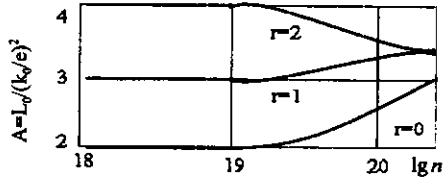
şəklinə düşür. Burada

$$A = \left[\frac{r+3}{r+1} \frac{F_{r+1}}{F_r} - \frac{(r+2)^2}{(r+1)^2} \frac{F_{r+1}^2}{F_r^2} \right] \quad (4.5.15)$$

Beləliklə, Lorens ədədi yarımkəçiricilərdə çox mühüm parametrlərlə, istilikkeçirmənin elektron toplananı müəyyən edir və uyğun düsturlara müvafiq olaraq Fermi səviyyəsinin vəziyyətindən, deməli aşqar atomlarının konsentrasiyası və həmçinin səpilmə mexanizmlərindən asılıdır (şək. 4.4).

İndi fonon istilikkeçirmə mexanizmini nəzərdən keçirək.

Kristallarda istilik enerjisini müxtəlif kvazizərrəciklər daşıya bilər. Bu bərk cismin növündən asılıdır. İzolyatorlarda fononlar; metallarda sərbəst elektronlar və fononlar; yarımkəçiricilərdə fononlar, elektron-deşik cütəri və eksitonlar; maqnit düzülüşü olan kristallarda maqnonlar və fononlar istilik enerjisinin daşıyıcılarıdır. Biz bu paragrafda yalnız izolyator olan (elektrik keçiriciliyi olmayan) bərk cisimlərə baxacağıq, yəni fonon qazının istilik keçiriciliyini nəzərdən keçirəcəyik. Metal və yarımkəçiricilərin istilik keçiriciliyi IV fəsildə şərh ediləcək.



Şəkil 4.4. Yarımkəçiricilərdə Lorens ədədinin səpilmə mexanizmindən və keçirici elektronların cırılma dərəcəsindən asılılığı

Fononların daşdığı enerji selinin sıxlığı

$$W = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \sum_j \hbar \omega_j(\vec{q}) \nu_j(\vec{q}) N_{\vec{q}} \quad (4.5.16)$$

Burada $\vec{\nu}_j(\vec{q}) = \nabla_{\vec{q}} \vec{\omega}_j(\vec{q})$ - kristalda yayılan elastiki dalğaların qrup sürəti, $\hbar \omega_j(\vec{q})$ - fononun enerjisi, $N_{\vec{q}}/V$ - fononların konsentrasiyası, V - kristalın həcmidir, $N_{\vec{q}}$ - fononların paylanma funksiyasıdır.

Sadəlik üçün Brave qəfəslı bərk cisimlərə baxaq və Debay modelini əsas götürək: $\omega_j(\vec{q}) = \nu_0 q$. Burada ν_0 - səs sürətidir. Bu zaman (4.5.16) ifadəsi

$$W = \frac{3}{V} \sum_{\vec{q}} \hbar \omega(\vec{q}) \vec{\nu}(\vec{q}) N(\vec{q}) \quad (4.5.17)$$

şəklində düşər.

Termodinamik tarazlıq halında kristalın bütün nöqtələrində temperatur T eyni olduqda fononların paylanma funksiyası

$$N(\vec{q}) = N_0(\omega(\vec{q})), \quad (4.5.17a)$$

burada $N_0(\omega(\vec{q})) = \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega(\vec{q})}{k_0 T}\right) - 1 \right]^{-1}$ Plank funksiyasıdır.

Plank funksiyasını yalnız $\omega(\vec{q})$ tezliyindən asılı olduğunu, tezliyin $\omega(\vec{q}) = \omega(-\vec{q})$ və onun törəməsi ilə təyin olunan qrup sürətinin $\vec{\nu}(\vec{q}) = -\vec{\nu}(-\vec{q})$ xassələrinə malik olduğunu nəzərə alsaq, (4.5.17)-də olan \vec{q} -yə görə cəmin sıfır bununlada $W = 0$ olduğunu görürük. Bu o deməkdir ki, termodinamik tarazlıq halında fononların konsentrasiyası koordinatdan asılı deyil, ona görə də fonon qazında heç bir enerji axını yoxdur.

Kristalda temperatur qradienti olarsa fononların konsentrasiyası koordinatdan asılı $N(\bar{q}, \bar{r})$ olar və temperatur yüksək olan tərəfdə fononların konsentrasiyası çox, temperatur aşağı olan tərəfdə isə fononların konsentrasiyası az olduğundan fononlar isti tərəfdən soyuq tərəfə diffuziya edərək istilik enerjisi daşıyırlar.

Kristalda \bar{r} nöqtəsi ətrafındakı fononların $N(\bar{q}, \bar{r})$ sayı diffuziya nəticəsində dəyişir. Bundan əlavə impulsu $\hbar\bar{q}$ olan fononların sayı isə fononların bir-biri ilə toqquşması və ya kristalın defektləri və sərhədlərindən səpilməsi nəticəsində dəyişir. Beləliklə, fononların sayının zamandan asılı olaraq dəyişməsi

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{diff}} + \left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{scat}} \quad (4.5.18)$$

olar. Buraya daxil olan $(\partial N / \partial t)_{\text{diff}}$ həddinin açıq şəklini tapmaq üçün fonon qazının lokal tarazlıq şərtindən istifadə edək. Bu şərtə görə fononların \bar{r} nöqtəsi ətrafında $(t + \Delta t)$ anındakı konsentrasiyası, onların t anında $(\bar{r} - \Delta\bar{r})$ nöqtəsi ətrafındakı konsentrasiyasına bərabər olmalıdır:

$$N(\bar{q}, \bar{r}, t + \Delta t) = N(\bar{q}, \bar{r} - \Delta\bar{r}, t), \quad (4.5.19)$$

burada $\Delta\bar{r} = \bar{v}\Delta t$ -yerdəyişmə, \bar{v} -fononların sürətidir.

Yerdəyişməni kiçik hesab edərək (4.5.19) bərabərliyinin sağ tərəfini \bar{r} -in üstünə görə sıraya ayırısaq,

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{diff}} = -\bar{v} \frac{\partial N}{\partial \bar{r}} \quad (4.5.20)$$

alırıq. Fonon sisteminin relaksasiya müddətini τ ilə işarə etsək,

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)_{\text{scat}} = -\frac{N - N_0}{\tau} \quad (4.5.21)$$

kimi yaza bilərik, burada $N_0(\bar{q})$ - termodinamik tarazlıq halında fononların sayı, yəni Plank funksiyasıdır, $N(\bar{q})$ -isə tarazlıq olmayan halda fononların sayıdır.

Stasionar halda $(\partial N / \partial t) = 0$ olduğunu nəzərə alsaq, (4.5.18), (4.5.20) və (4.5.21)-dan fonon qazı üçün Bolsman kinetik tənliyi

$$\bar{v} \frac{\partial N}{\partial \bar{r}} + \frac{N - N_0}{\tau} = 0 \quad (4.5.22)$$

alırıq.

$\frac{\partial N}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial N}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = \frac{\partial N}{\partial T} \nabla T$ olduğunu nəzərə alsaq, (4.5.22)

$$\bar{v} \frac{\partial N}{\partial T} \nabla T + \frac{N - N_0}{\tau} = 0 \quad (4.5.23)$$

şəklinə düşər. Temperatur qradientinə görə xətti yaxınlaşmada (4.5.23) tənliyinin birinci həddində $N(\bar{q}) = N_0(\bar{q})$ götürə bilər. Beləliklə, (4.5.23) tənliyindən tarazlıqda olmayan fonon qazının $N(\bar{q}, \bar{r})$ sayı üçün

$$N(\bar{q}, \bar{r}) = N_0(\bar{q}) - \tau \bar{v} \frac{\partial N_0(\bar{q})}{\partial T} \nabla T \quad (4.5.24)$$

alarıq. Bu həlli (4.5.17)-də yerinə yazsaq, enerji selinin sıxlığı üçün

$$W = -\frac{3}{V} \sum_q \hbar \omega(\bar{q}) \frac{\partial N_0(\bar{q})}{\partial T} (\bar{v} \bar{v}) \nabla T \quad (4.5.25)$$

alarıq. Bu vektorun ifadəsini komponentlərdə yazsaq,

$$W_i = -K_i \nabla_i T \quad (4.5.25a)$$

Burada

$$\chi_{ij} = \frac{3}{V} \sum_q \hbar \omega(\bar{q}) \frac{\partial N_0(\bar{q})}{\partial T} (\bar{v}_i \bar{v}_j) \quad (4.5.26)$$

istilik keçiriciliyi tenzorunun komponentləridir.

Kubik kristallar və amorf maddələr halında Debay modeli üçün

$$\bar{v} = \frac{\partial \omega}{\partial \bar{q}} = \frac{\omega}{\bar{q}} = \nu_0 \frac{\bar{q}}{q}, \text{ burada } \nu_0 - \text{səsin sürətidir.}$$

Məlum bərabərliyə əsasən (4.5.26)-da cəmdən inteqrala keçərək və inteqrallamanı sferik koordinat sistemində aparıb bucaqlara görə inteqralı götürsək,

$$\chi_{xx} = \chi_{yy} = \chi_{zz} = \chi \quad \text{üçün} \quad \chi = \frac{1}{2\pi^2} \int \hbar \omega \nu_0^3 \frac{\partial N_0(\bar{q})}{\partial T} q^2 dq \quad (4.5.27)$$

alarıq, yəni baxdığımız halda istilik keçiriciliyi skalyar kəmiyyətdir. Relaksasiya müddətinin orta qiymətini $\tau = \bar{\tau}$ inteqraldan kənara çıxarsaq və $q = \omega/\nu_0$ olduğunu nəzərə alsaq,

$$\chi = \frac{\hbar}{2\pi^2 \nu_0} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^3 \left(\frac{\partial N_0}{\partial T} \right) d\omega \quad (4.5.28)$$

əldə edirik, burada $\omega_{\max} = \nu_0 \left(\frac{6\pi^2}{\Omega_0} \right)^{1/3}$ - Debay tezliyidir.

Plank funksiyasının temperatura görə törəməsi $\frac{\partial N_0}{\partial T} = \frac{\hbar \omega}{k_0 T^2} e^{\hbar \omega / k_0 T} (e^{\hbar \omega / k_0 T} - 1)^{-2}$ olduğundan (4.5.28)

$$\chi = \frac{1}{3} \nu_0 \Lambda \frac{9k_0 N}{V} \left(\frac{T}{\theta} \right)^{2\theta/T} \int_0^{\theta/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} \quad (4.5.29)$$

şəklinə düşər, burada $\Lambda = \nu_0 \bar{\tau}$ - fononların sərbəst yolunun uzunluğudur. İstilik tutumunun ifadəsini yada salsaq, fonon istilik keçiriciliyi (4.5.29) bərabərliyini

$$\chi = \frac{\nu_0}{3} \Lambda(T) C_v(T) \quad (4.5.30)$$

kimi yazı bilərik, burada $C_v = 3k_0 n_0 L_v(\theta/T)$ - kristalın xüsusi istilik tutumu, $n_0 = N/V$ - vahid həcmdə olan özəklərin sayıdır.

Beləliklə, fonon istilik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı istilik tutumunun $C_v(T)$ və fononların sərbəst yolunun uzunluğunun $\Lambda(T)$ temperaturdan asılılığı ilə təyin olunur.

İndi fononların sərbəst yolunun uzunluğunun temperaturdan asılılığı $\Lambda(T)$ funksiyasını bir qədər ətraflı nəzərdən keçirək.

Sərbəst yolun uzunluğunun $\Lambda(T)$ fononların kristalın defektlərindən (dislokasiyalar, izotoplar), həm də nümunənin sərhədlərindən səpilməsi və onların bir-biri ilə toqquşması, yəni fonon-fonon qarşılıqlı təsiri ilə təyin olunur.

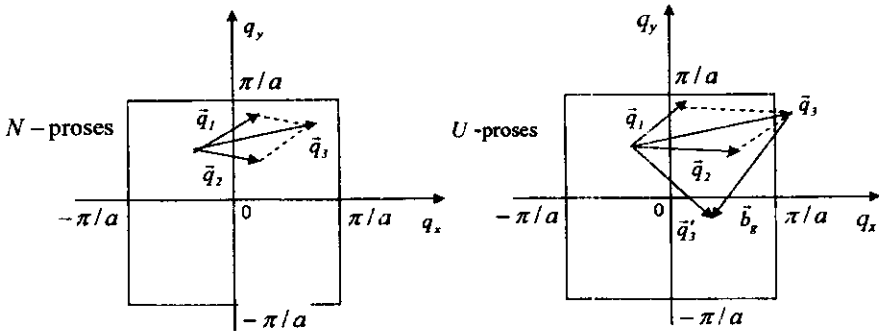
Fononların qarşılıqlı təsir nəzəriyyəsi olduqca çətin problemdir. Harmonik yaxınlaşmada fononlar arasında heç bir qarşılıqlı təsir yoxdur, yəni fonon qazı ideal qazdır.

Bu yaxınlaşmada ideal kristallarda fononların sərbəst yolunun uzunluğunun $\Lambda \Rightarrow \infty$, yəni istilik keçiriciliyi $\chi \Rightarrow \infty$ olur və istilik müqaviməti (thermal resistivity) $1/\chi \Rightarrow 0$ olur.

Nəzəri olaraq sonlu istilik keçiriciliyi almaq üçün kristalın Hamilton funksiyasında anharmonik həddi yazmaq və bu həddə bir həyəcanlanma kimi baxmaq lazımdır. Bu harmonik həyəcanlanma potensialının təsiri nəticəsində fonon dalğa vektoru \vec{q} olan bir kvant halından başqa bir \vec{q}' halına keçir, yəni fononlar bir-biri ilə toqquşaraq impulslarını dəyişər və bununla da sərbəst yolunun uzunluğu azalar, yəni sonlu olar.

Fonon-fonon qarşılıqlı təsirində iki cür proses mümkündür: N - normal proseslər və U - qayıdış prosesləri (*umklapp process*, *процессы непербора*).

N - proseslər elə proseslərdir ki, \vec{q}_1 və \vec{q}_2 dalğa vektoru olan iki fonon toqquşarkən alınan fononun dalğa vektoru \vec{q}_3 birinci Brülliyen zonasının daxilində qalır. Bu zaman impulsun saxlanması qanunu bir qiymətli ödənilir (şəkil 4.5):



Şəkil 4.5. Müxtəlif proseslərdə fononların qarşılıqlı təsiri

$$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3; \quad N - \text{proses} \quad (4.5.31)$$

U - proseslər elə proseslərdir ki, toqquşma zamanı alınan dalğa vektoru birinci Brülliyen zonasından kənara çıxır və onu birinci Brülliyen zonası daxilinə qaytarmaq üçün onun üzərinə ixtiyari \vec{b}_x tərs qəfəs vektoru əlavə etmək lazımdır (şəkil 4.5):

$$\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3 + \vec{b}_x; \quad U - \text{proses.} \quad (4.5.32)$$

$\omega(\vec{q}_3) = \omega(\vec{q}_1 + \vec{b}_x)$ olduğundan hər iki proses zamanı enerjinin saxlanması qanunu ödənilir:

$$\hbar\omega_1(\vec{q}_1) + \hbar\omega_2(\vec{q}_2) = \hbar\omega_3(\vec{q}_3). \quad (4.5.33)$$

Lakin impulsun saxlanması yalnız N - proseslərdə ödənilir. U - proseslərdə isə impulsun saxlanması qanunu ödənilmir, bu zaman $\vec{q}_1 + \vec{q}_2$ cəmi \vec{q}_3 vektoruna deyil, $\vec{q}'_3 = \vec{q}_3 + \vec{b}_x$ vektoruna bərabər olur. Buna görə (şəkil 4.5-dən görüldüyü kimi) N - proseslər fononun sərbəst yolunun uzunluğunu dəyişdirmir və ona görə də istilik keçiriciliyinə təsir etmir. U - proseslər isə fononların sərbəst yolunun uzunluğunu dəyişdirir və istilik müqaviməti yaradır.

İndi bu deyilənlər əsasında kristalın istilik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığını təhlil edək.

Çox aşağı temperaturlarda ($T \rightarrow 0$) kristalda yalnız kiçik dalğa vektoru olan ($aq \ll 1$) olan fononlar oyandığından onlar arasındakı toqquşmalar N - proseslərdir və bu proseslər fononların sərbəst yolunu dəyişdirmir. Belə aşağı temperaturlarda fononların sərbəst yolu kristalın defektlərindən və ya nümunənin sərhədlərindən səpilmə ilə təyin olunur, ona görə də T -dən asılı olmur: $\Lambda(T \rightarrow 0) = \text{const}$. Temperaturun bu oblastında kristalın istilik tutumu $C_v(T) \sim T^3$ olduğundan (4.5.30) münasibətinə əsasən

$$\chi(T) \Big|_{T \rightarrow 0} = \text{const} \cdot T^3 \quad (4.5.34)$$

alınır. Bu fononların aşağı temperaturlarda kristalın defektlərindən və nümunənin sərhədlərindən səpilməsi nəticəsində fononun istilik keçiriciliyidir.

Temperatur artdıqca daha böyük impulsa (dalğa vektoruna) malik olan fononlar oyanır və N -proseslərlə yanaşı U -proseslər baş verir. U - proseslərdə iştirak edə bilən fononların dalğa ədədini q_v , uyğun tezliyi isə ω_v ilə işarə edək. Bu cür fononların sayı $N_v = (e^{\hbar\omega_v/k_B T} - 1)^{-1}$ çox olduqca fononların sərbəst yolu bir o qədər qısa olar, yəni $\Lambda \sim N_v^{-1} = (e^{\hbar\omega_v/k_B T} - 1)$. Beləliklə, temperatur artdıqca U -proseslərdə iştirak edən fononların sayı artır və bununla da sərbəst yolun uzunluğu eksponensial olaraq azalır.

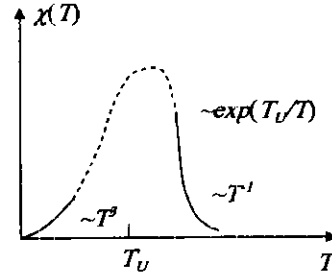
Temperaturun müəyyən qiymətində ($T_v \approx \hbar\omega_v / k_0$) sərbəst yolun $\Lambda(T) \sim e^{\hbar\omega_v / k_0 T}$ eksponensial azalması istilik tutumu $C_v(T)$ -nin artmasını üstələyir və $T > T_v$ temperaturlarından sonra $\chi(T)$ azalmağa başlayır, yəni $T \approx T_v$ oblastında istilik keçiriciliyi maksimumdan keçməlidir və

$$\chi(T) \sim \exp\left(\frac{T_v}{T}\right); \quad T \geq T_v \quad (4.5.35)$$

kimi eksponensial olaraq azalmalıdır (şəkil 4.6.).

Qeyd edək ki, U - proseslərin əsas olmağa başladığı temperatur T_v debay temperaturu θ -dan aşağı olduğundan ($T_v < \theta$) fonon istilik keçiriciliyinin maksimumu da debay temperaturundan aşağıda müşahidə olunmaqdadır.

Temperatur daha da yüksəldikcə ($T \gg T_v$) U - proseslərdə iştirak edən fononların sayı $N_v \approx \frac{k_0 T}{\hbar\omega_v} = \frac{T}{T_v}$



Şəkil 4.6. İstilik keçiriciliyinin temperatur asılılığı

kimi artır və uyğun olaraq fononların sərbəst yolunun uzunluğu $\Lambda(T) \sim N_v^{-1} \sim T^{-1}$ kimi azalır. Temperaturun bu oblastında istilik tutumunun T -dən zəif asılı olduğunu nəzərə alsaq istilik keçiriciliyinin T ilə tərs mütənəsb olaraq azaldığını deyə bilərik:

$$\chi(T) \sim C_v \cdot T^{-1} \sim T^{-1}; \quad T \gg T_v \quad (4.5.36)$$

Aydın ki, uyğun olaraq kristalın fonon istilik müqaviməti $T \approx T_v$ temperaturunda minimumdan keçməlidir. Qeyd edək ki, istilik keçiriciliyinin şəkil 4.6-da göstərilən temperatur asılılığı təcrübələrdə müşahidə edilmişdir.

§ 4.6. Qalvanomaqnit effektlər

Qeyri-tarazlıq paylanma funksiyasını təyin edərkən biz yarımkəçiricilərdə baş verən kinetik hadisələrin adlarını çökdük. İndi isə həmin hadisələrin başvermə səbəblərini və ayrı-ayrı səpilmə mexanizminin onlara göstərdiyi təsiri kinetik tənliyin həlli əsasında müfəssəl araşdıracağıq. Xarici sahələrin xarakterinə və başvermə

mexanizminə görə kinetik effektlər bir neçə qrupa bölünür. Bu qruplara ayrı-ayrılıqda baxacağıq.

Eyni zamanda xarici elektrik və maqnit sahələrinin təsirinə məruz qalan kristaldan elektrik cərəyanı keçərkən baş verən fiziki hadisələrə **qalvanomaqnit hadisələri və ya effektləri** deyilir. Bu halda dörd effekt müşahidə olunur. Bunların meydana çıxma səbəbini sərbəst yükdaşıyıcılara elektrik və maqnit sahələrinin birlikdə göstərdiyi təsiri araşdırmaqla müəyyən etmək olar. Məlumdur ki, hərəkətdə olan yüklü zərrəciyə elektrik və maqnit sahəsinin təsiri Lorens qüvvəsi ilə xarakterizə olunur:

$$\vec{F} = e\vec{E} + e[\vec{v}\vec{B}], \quad (4.6.1)$$

burada e -zərrəciyin yükü, \vec{v} -sürəti, \vec{E} -elektrik sahəsinin intensivliyi, \vec{B} -maqnit sahəsinin induksiya vektorudur. Zərrəciyin hərəkət sürəti maqnit sahəsinə paraleldirsə ($\vec{v} \parallel \vec{B}$), onda (4.6.1)-dən görüldüyü kimi $[\vec{v}\vec{B}] = 0$ və maqnit sahəsi zərrəciyin hərəkətinə heç bir təsir göstərmir. Belə zərrəcik yalnız elektrik sahəsinin təsirinə məruz qalır və \vec{E} istiqamətində dreyf edir. Maqnit sahəsi yüklü zərrəciyə o vaxt təsir göstərir ki, onun sürət vektorunun maqnit sahəsinə perpendikulyar olan toplananı (v) sıfırdan fərqli olsun.

Tutaq ki, maqnit və elektrik sahələrinin istiqaməti eynidir ($\vec{B} \parallel \vec{E}$). Onda maqnit sahəsinə (əslində hər iki sahəyə) perpendikulyar və paralel istiqamətdə zərrəciyə təsir edən qüvvələr, (4.6.1)-dən görüldüyü kimi:

$$F_{\parallel} = eE, \quad F_{\perp} = ev_{\perp}B, \quad (4.6.2)$$

yəni yüklü zərrəcik elektrik sahəsinin təsiri ilə \vec{E} istiqamətində (və ya \vec{v}_{\parallel} istiqamətində) təcil alır, maqnit sahəsinin təsiri ilə isə çevrə boyunca sabit (mütləq qiymətcə) v_{\perp} sürəti ilə hərəkət edir. Başqa sözlə, F_{\perp} mərkəzəqaçma qüvvəsi rolunu oynayır:

$$F_{\perp} = \frac{mv_{\perp}^2}{r}, \quad (4.6.3)$$

burada m -zərrəciyin kütləsi, r -çevrənin radiusudur. (4.6.2) və (4.6.3)-ün müqayisəsindən:

$$r = \frac{mv_{\perp}}{eB} = \frac{v_{\perp}}{\left(\frac{eB}{m}\right)} = \frac{v_{\perp}}{\omega_c}; \quad \omega_c = \frac{eB}{m}, \quad (4.6.4)$$

burada ω_c , düsturdan görüldüyü kimi, məlum siklotron tezliyidir, özü də B sabit olduğu üçün ω_c də sabitdir. Deməli, bu halda yüklü zərrəcik hər iki sahə istiqamətində addımı getdikcə artan, radiusu isə sabit qalan spiral boyunca hərəkət edir.

İndi isə tutaq ki, elektrik və maqnit sahələri bir-birinə perpendikulyardır ($\vec{B} \perp \vec{E}$). Buna **çarpazlaşmış sahələr** də deyirlər. Bu hal köçürmə hadisələri üçün daha böyük maraq kəsb edir. Bu halda zərrəcik yenə də iki hərəkətdə iştirak edir. Onlardan biri elektrik sahəsi istiqamətində (\vec{E} istiqamətində) irəliləmə hərəkəti, digəri isə maqnit sahəsi ətrafında (daha doğrusu \vec{B} -yə perpendikulyar müstəvi üzrə) çevrə boyunca baş verən hərəkətdir, həm də elektrik sahəsi istiqamətdə yüklü zərrəciyin dreyfi nəticəsində sürətin maqnit sahəsinə perpendikulyar komponenti həmişə sıfırdan fərqlidir və deməli, zərrəcik həmişə maqnit sahəsinin təsirinə məruz qalır. Çarpazlaşmış elektrik və maqnit sahələrində başlanğıc sürəti sıfır olan yüklü zərrəciyin yekun hərəkətinin trayektoriyası bir-birinin ucuna düzülmüş sikloidlər şəklində olacaq. Zərrəciyin başlanğıc sürətinin elektrik sahəsi istiqamətindəki komponenti sıfırdan fərqlidirsə, onun trayektoriyası uc-uca düzülmüş traxoidlər (dartılmış və ya sıxılmış sikloidlər) şəklində olacaq. Başlanğıc sürətin maqnit sahəsi istiqamətindəki toplananı sıfırdan fərqli olduqda nəzərə almaq lazımdır ki, onun qiymətinə nə maqnit sahəsi, nə də elektrik sahəsi heç bir təsir göstərmir.

Biz yükdaşıyıcıların bərk cisim daxilindəki hərəkətinə baxırıqsa, onda hadisələr bir qədər də mürəkkəbləşir və onların kristal qəfəsinin qüsurları ilə toqquşmasını (səpilməni) nəzərə almalıyıq. Hər bir toqquşmadan sonra yükdaşıyıcı əslində yeni parametrlərlə xarakterizə olunan vintvari və ya traxoidşəkilli trayektoriya üzrə hərəkət edəcək.

Qalvanomagnit hadisələrini kinetik tənliyin həlli əsasında maqnit sahəsinin ixtiyari qiymətində araşdırma bilərik, lakin bu zaman (ümumi halda) nəticədə alınan kinetik əmsalları elementar funksiyalar vasitəsi ilə ifadə etmək mümkün deyil. Ona görə də biz müfəssəl araşdırmanı iki xüsusi hal üçün: a) zəif maqnit sahəsi və b) qüvvətli maqnit sahəsi üçün aparacağıq. İndi zəif və qüvvətli sahə şərtini müəyyənləşdirək. ω_c

dairəvi tezliyi ilə çevrə boyunca hərəkətin fırlanma periodu $T_c = \frac{2\pi}{\omega_c}$

dir. Yükdaşıyıcıların relaksasiya müddəti T_c periodundan çox-çox böyük olduqda iki ardıcıl toqquşma arasındakı müddət ərzində hər bir zərrəcik vintvari və ya traxoidşəkilli trayektoriya üzrə bir neçə dövr edəcək. Əks halda (yəni $\tau \ll T_c$ olduqda), hətta bir dövr də etməyə macal tapmayacaq. Maqnit sahəsinin birinci halı ödəyən qiymətlərinə qüvvətli, ikinci halı ödəyən qiymətlərinə isə zəif maqnit sahəsi deyəcəyik. Onda zəif maqnit sahəsi şərti:

$$\frac{\tau}{T_c} \ll 1, \text{ yaxud } \frac{\tau \omega_c}{2\pi} \ll 1 \text{ və ya } \frac{e\tau B}{2\pi m} \ll 1. \quad (4.6.5)$$

Qüvvətli maqnit sahəsi şərti isə:

$$\frac{\tau}{T_c} \gg 1, \quad \frac{\tau \omega_c}{2\pi} \gg 1, \quad \frac{e \tau B}{2\pi m'} \gg 1, \quad (4.6.6)$$

burada $\frac{e(\tau)}{m'}$ olduğunu nəzərə alsaq, bu şərtləri belə yazıla bilər:

$$\frac{\mu B}{2\pi} \ll 1, \quad \text{yaxud} \quad \mu B \ll 1. \quad (4.6.7)$$

$$\frac{\mu B}{2\pi} \gg 1, \quad \text{yaxud} \quad \mu B \gg 1. \quad (4.6.8)$$

Deməli, zəif və qüvvətli maqnit sahəsi anlayışı yalnız xarici maqnit sahəsinin induksiya vektorunun qiymətindən asılı olmayıb, həm də yarımkeçiricidə yükdaşıyıcıların yürüklüyünün qiymətindən asılıdır (bir yarımkeçirici üçün zəif olan maqnit sahəsi digəri üçün qüvvətli ola bilər). Sərbəst yolun uzunluğu $l = v\tau$ və fırlanma hərəkətində $v = \omega r$ olduğunu nəzərə alsaq, zəif və güclü sahə şərtini başqa cür də mənalandıra bilərik. Məsələn,

$$\omega_c \tau = \frac{v}{r} \cdot \frac{l}{v} = \frac{l}{r} \ll 1 \quad (4.6.9)$$

şərti (4.6.5) ilə eynidir. Deməli, sərbəst yolun uzunluğu l yükdaşıyıcının maqnit sahəsindəki dairəvi hərəkətinin orbitinə uyğun gələn radiusdan (r) çox-çox kiçik olarsa, maqnit sahəsini zəif, çox-çox böyük olarsa – qüvvətli adlandıracağıq.

Əvvəlcə qalvanomaqnit effektlərin yaranma mənzərəsini keyfiyyətcə şərh edək.

1. Holl effekti. Tutaq ki, kristalımız düzbucaqlı paralelepiped şəklindədir. Koordinat başlanğıcını paralelepipedin təpə nöqtələrindən birində yerləşdirib, oxları isə onun tilləri üzrə yönəldək. Sadəlik üçün hələlik qəbul edək ki, yarımkeçirici aşqar keçiriciliyə (n və ya p -tip) malikdir və kristalda yalnız bir növ yükdaşıyıcı (elektron və ya deşik) mövcuddur. Elektrik sahəsini x oxuna ($\vec{E} \parallel \vec{x}$), maqnit sahəsini isə y oxuna paralel ($\vec{B} \parallel \vec{y}$) götürək. Maqnit sahəsi olmadıqda ($\vec{B} = 0$) elektrik sahəsinin (\vec{E}) təsiri nəticəsində x oxu istiqamətdə kristaldan keçən cərəyanın sıxlıq vektoru:

$$\vec{j} = \pm en\vec{v}_d = en\mu\vec{E} = \sigma\vec{E}. \quad (4.6.10)$$

Düsturda minus işarəsi elektron, plus işarəsi isə deşik keçiriciliyi üçün yazılmışdır. \vec{v}_d dreyf sürəti ($\vec{v}_d = \pm\mu\vec{E}$) elektron və deşik üçün bir-birinin əksinə yönəldiyi üçün hər iki halda cərəyanın istiqaməti eynidir (\vec{E} istiqamətində).

Bircinsli kristal üçün ekvipotensial səthlər elektrik sahəsinə (\vec{E}) və deməli cərəyan sıxlığı vektoruna perpendikulyardır. Ona görə də kristalın x oxuna perpendikulyar olan istənilən müstəvi ilə kəsikdə ekvipotensial səthlər alınır.

Belə səthlərdən biri 4.7.-ci şəkildə göstərilmişdir. Bu səthin üzərində olub, paralelepipedin z oxu istiqamətindəki üst və alt üzərində yerləşən hər hansı A və B nöqtələrinin arasındakı potensiallar fərqi sıfırdır.

İndi tutaq ki, maqnit sahəsi qoşulmuşdur və \vec{B} , y oxunun müsbət istiqaməti ilə üst-üstə düşür. Bu zaman hər bir yükdaşıyıcıya əlavə Lorens qüvvəsi təsir edəcək:

$$\vec{F} = \pm e[\vec{v}\vec{B}]. \quad (4.6.11)$$

Burada \pm işarəsi yükdaşıyıcının deşik və ya elektron olduğunu göstərir. Aydındır ki, \vec{F} qüvvəsi \vec{v} -yə (\vec{E} -yə) və həm də \vec{B} -yə perpendikulyardır.

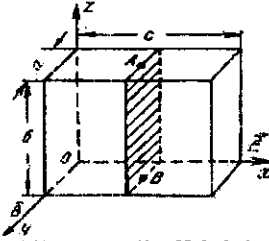
$$\vec{v} = \pm \mu \vec{E} = \pm \frac{e\langle \tau \rangle}{m^*} \vec{E} \quad (4.6.12)$$

olduğundan:

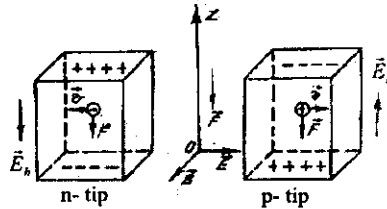
$$\vec{F} = \frac{e^2 \langle \tau \rangle}{m^*} [\vec{E}\vec{B}]. \quad (4.6.13)$$

Hər iki yükdaşıyıcı üçün \vec{F} -in işarəsi (istiqaməti) eynidir (bunu \pm işarəsini e -yə daxil etməklə də alarıq. \vec{F} -in ifadəsində e^2 olduğu üçün o, yükün işarəsindən asılı olmayacaq). Deməli, \vec{F} -in istiqaməti yükdaşıyıcının yükünün işarəsindən asılı olmayıb, yalnız xarici elektrik və maqnit sahəsinin istiqamətindən asılıdır. 4.7.-

ci şəkildə göstərilən hal üçün maqnit sahəsi tərəfindən yükdaşıyıcılara təsir edən qüvvə z oxunun əks istiqamətdə yönələcək. Bunu həm (4.6.13) ifadəsindəki vektor hasildən və həm də sol əl qaydası ilə təyin edə bilərik. Onda maqnit sahəsinin təsiri ilə yükdaşıyıcıların şəkildə



Şəkil 4.7. Həll effektinin müşahidəsində düzbucaqlı paralelepiped formalı nümunəyə nəzərən elektrik və maqnit sahələrinin vəziyyəti

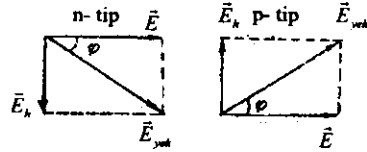


Şəkil 4.8. Həll effektində yükdaşıyıcılara təsir edən qüvvənin istiqamətinin təyini

göstərilən paralelepipedin alt üzünə doğru axını baş verəcək. Nəticədə alt üzdə yükdaşıyıcıların işarəsinə uyğun yüklərin artıqlığı, üst üzdə isə həmin yüklərin çatışmazlığı yaranacaq. n -tip kristalda alt üz mənfi, üst üz müsbət və p -tip kristalda əksinə yüklənəcək (şəkil 4.8.). Beləliklə, xarici elektrik və maqnit sahələrinə perpendikulyar istiqamətdə əlavə elektrik sahəsi yaranacaq. Kristaldan elektrik cərəyanı keçərkən ona perpendikulyar istiqamətdə yönəlmiş maqnit sahəsinin təsiri nəticəsində cərəyana və maqnit sahəsinə perpendikulyar istiqamətdə əlavə elektrik sahəsi yaranması hadisəsinə **Holl effekti**, yaranmış elektrik sahəsinə isə **Holl sahəsi** deyilir. Holl sahəsinin intensivliyinin \vec{E}_h ilə işarə edəcəyik. Əlbət ki, yükdaşıyıcıların yuxarıda göstərdiyimiz kimi meyl və onların alt və ya üst üzə toplanması sonsuz davam edə bilməz. Çünki yaranmış Holl sahəsi bu axına mane olur və yükdaşıyıcılara \vec{F} - Lorens qüvvəsinin əksinə yönəlmiş qüvvə ($e\vec{E}_h$) ilə təsir edir. Yüklərin alt və üst üzə axını bu qüvvələr bir-birinə bərabər olana qədər davam edir:

$$\pm eE_h = F_l \text{ və ya } \pm eE_h = evB. \quad (4.6.14)$$

Bu şərt ödəniləndə Holl sahəsinin qiyməti artır və nəhayət bu şərt ödənildikdən sonra E_h -in qiyməti sabitləşir, artıq yükdaşıyıcılar öz düzxətli trayektoriyalarından meyl etməzlər, cərəyanın istiqaməti isə xarici elektrik sahəsinin istiqaməti ilə eyni olur. Lakin, yekun elektrik sahəsi $\vec{E}_{\text{yək}} = \vec{E} + \vec{E}_h$ artıq xarici sahə ilə eyni deyil və onunla müəyyən φ bucağı



Şəkil 4.9. Müxtəlif tip keçiriciliyə malik yarımkəçiricilərdə Holl sahəsinin istiqaməti

əmələ gətirir (bu Holl bucağı adlanır). 4.8.-ci şəkildən görüldüyü kimi, xarici elektrik və maqnit sahələrinin eyni cür səmtlənməsində n və p -tip kristal üçün Holl sahəsinin istiqaməti bir-birinin əksinə olur. Hər iki hal üçün elektrik sahələrinin toplanması 4.9.-cu şəkildə sxematik göstərilmişdir. Holl bucağı belə təyin olunur:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{|\vec{E}_h|}{|\vec{E}|}. \quad (4.6.15)$$

Şəkildən görünür ki, φ bucağı n -tip kristal üçün mənfi, p -tip üçün isə müsbətdir.

Kristalda yekun elektrik sahəsinin istiqaməti artıq maqnit sahəsi olmayan haldan fərqləndiyi və ona nisbətən φ bucağı qədər döndüyü üçün ekvipotensial səthlər də öz əvvəlki vəziyyətini dəyişəcək və 4.7.-ci

şekildə göstərilmiş (ştrixlənmiş) AB müstəvisi də φ bucağı qədər dönəcək. 4.10.-cu şəkildə n və p -tip kristal üçün 4.7.-ci şekildəki paralelepipedin A və B nöqtələrindən keçən və z oxuna paralel olan müstəvi ilə kəsiyi göstərilmişdir. p - tip kristal üçün ekvipotensial səth üzərində yerləşən AB düz xətti maqnit sahəsi qoşulduqdan sonra $A'B'$ vəziyyətini, n -tip kristal üçün isə A^*B^* vəziyyətini alır, yəni artıq A və B nöqtələri ekvipotensial səth üzərində deyil və onlar arasındakı potensiallar fərqi sıfırdan fərqlidir. A və B nöqtələri arasındakı potensiallar fərqi Holl potensiallar fərqi və ya Holl elektrik hərəkət qüvvəsi (e.h.q) deyirlər:

$$V_h = bE_h, \quad (4.6.16)$$

burada b - paralelepipedin z oxu istiqamətindəki ölçüsüdür. Holl təcrübi olaraq müəyyən etmişdir ki, \vec{E}_h gərginliyi $[\vec{B} \vec{J}]$ hasilini ilə mütənəsidir:

$$\vec{E}_h = R[\vec{B} \vec{J}] = -R[\vec{J} \vec{B}], \quad (4.6.17)$$

burada R - mütənəsiblik əmsəlidir, onu Holl əmsəli adlandırırlar.

$$\vec{E}_h = (0, 0, E_h), \quad \vec{B} = (0, B, 0), \quad \vec{J} = (j, 0, 0) \quad (4.6.18)$$

olduğunu (4.6.17)-də nəzərə alsaq:

$$R = \frac{V_h}{bjB} = \frac{aV_h}{IB}, \quad (4.6.19)$$

burada $I = abj$ - cərəyan şiddəti, a - paralelepipedin maqnit sahəsi istiqamətindəki ölçüsüdür. (4.6.19)-un sağ tərəfində iştirak edən bütün kəmiyyətlər təcrübədə ölçülə biləndir və ona görə də Holl əmsəlini (4.6.19) ifadəsindən təyin etmək olar. Beynəlxalq vahidlər sistemində

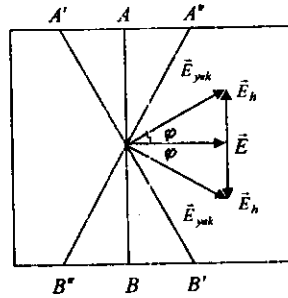
$a = 1m, V_h = 1B, I = 1A, B = |Tl| = 1 \frac{B \cdot s}{m^2}$ götürsək, $R = 1 \frac{m^3}{KI}$ olar. Adətən (4.6.19)

düsturundan istifadə edərkən uyğun kəmiyyətlər üçün sm, B, A Qaussdan istifadə edirlər. R -i $\frac{sm^3}{KI}$ -la ölçmək üçün (4.6.19) düsturunu belə

yazmalıyıq:

$$R \left(\frac{sm^3}{KI} = 10^8 \frac{V_h(B)a(sm)}{I(A)B(\Gamma c)} \right). \quad (4.6.20)$$

Holl bucağını təyin edək:



Şəkil 4.10. n - və p -tip kristallarda Holl potensiallar fərqi yararması

$$\operatorname{tg} \varphi = \pm \frac{|\vec{E}_*|}{|\vec{E}|} = \pm \frac{R|\vec{j} \vec{B}|}{|\vec{E}|} = \pm R \frac{|\sigma \vec{E} \vec{B}|}{|\vec{E}|} = \pm \sigma R B = \pm \mu_* B, \quad (4.6.21)$$

burada

$$\mu_* = \sigma |R| \quad (4.6.22)$$

övəzləməsini etdik.

(4.6.21)-də (+) dəşiklər, (-) elektronlar üçündür. μ_* kəmiyyətinə **Holl yürüklüyü** deyirlər. Sonra görəcəyik ki, Holl yürüklüyü dreyf yürüklüyündən bir sabit vuruqla fərqlənir (bu vuruq 1 ilə 2 arasında dəyişir). (4.6.21)-dən görüldüyü kimi, Holl bucağı və deməli Holl e.h.q-si yürüklüyü böyük olan maddələr üçün daha böyükdür.

Bir cəhətə fikir verək ki, elektrik və maqnit sahələrindən birinin istiqamətini dəyişdirdikdə Holl e.h.q-nin də işarəsi dəyişir, eləcə də e.h.q-nin işarəsi yükdaşıyıcının yükünün işarəsindən də asılıdır. Bu cəhətdən **Holl effektini «tək effekt»** adlandırmaq olar.

Burada yalnız bir növ yükdaşıyıcısı olan yarımkəçiricidə Holl effektinə baxdıq. İki növ yükdaşıyıcısı (elektron və dəşik) olan halda araşdırdığımız mənzərədə keyfiyyətcə elə bir dəyişiklik olmur, ancaq hər iki növ yükdaşıyıcı paralelepipedin eyni üzünə doğru meyli etdikləri üçün bu halda Holl sahəsinin qiyməti kiçik olacaq və deməli effekt bir növ yükdaşıyıcı olan haldan zəif olacaq. Bütün bunları və müxtəlif səpilmə mexanizmlərinin effektin baş verməsində oynadığı rolu biz bir qədər sonra, onu kinetik tənliyin həlli əsasında araşdırarkən, dəqiq hesablamalar nəticəsində alacağıq. İndi isə növbəti effektə baxaq.

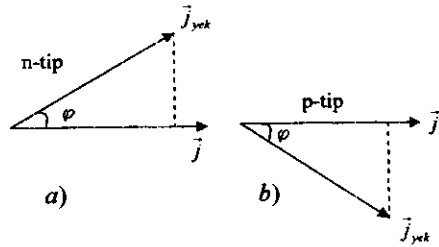
2. Müqavimətin maqnit sahəsinin təsiri ilə dəyişməsi (Qauss effekti).

Baxdığımız halda nümunənin z oxu istiqamətdəki (həm mənfi, həm müsbət) ölçüsünü sonsuz böyük götürsək, onda maqnit sahəsinin təsiri ilə elektrik cərəyanı öz əvvəlki istiqamətindən φ bucağı qədər meyli edəcək. Özü də cərəyanın meyli yekun elektrik sahəsinin meylinin əksinə olacaqdır. Bu, n və p -tip kristallar üçün 4.11-ci şəkildə göstərilmişdir. Yekun cərəyanın əvvəlki istiqamət (x oxu) üzrə proyeksiyası maqnit sahəsi olmayan haldan nəzərə çarpacaq dərəcədə kiçik olacaq. Bu isə elektrik keçiriciliyinin kiçilməsinə yaxud xüsusi müqavimətin artmasına ekvivalentdir. Bu hadisəyə maqnit sahəsində xüsusi müqavimətin dəyişməsi və ya **Qauss effekti**, bəzən də **maqnetorezistivlik** deyirlər, lakin dediklərimizdən belə yanlış təəvvür yaranmamalıdır ki, Gauss effekti, yalnız sonsuz kristalda baş verir. Sonlu ölçülü kristalda müqavimətin dəyişməsini yükdaşıyıcının maqnit sahəsinin təsiri ilə öz düzxətli trayektoriyasından meyli etməsi ilə izah etmək olar. Bunun üçün tutaq ki, əvvəlcə kristalda yalnız elektrik sahəsi təsir edir

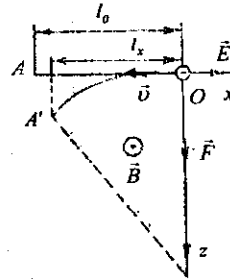
($\vec{B}=0$). Onda O nöqtəsində (koordinat başlanğıcında) olan elektron düz xətt boyunca \vec{E} -nin əks istiqamətində hərəkət edərək iki ardıcıl toqquşma arasında l_0 məsafəsini ($l_0 = OA$) qət edəcək (şəkil 4.12). Maqnit sahəsi qoşulduqda isə O nöqtəsində olan elektron artıq çevrə boyunca hərəkət edərək iki ardıcıl toqquşma arasında yenə də l_0 -a bərabər olan məsafəni (əlbət ki, baxdığımız həddə maqnit sahəsinin təsiri ilə sərbəst yolun uzunluğunun dəyişəcəyini düşünmək düzgün olmaz) OA' əyri xətti boyunca gedəcək ($l_0 = OA'$) -in x oxu üzrə proyeksiyası $l_x < l_0$, yəni maqnit sahəsi olmayanda τ müddətində elektron E istiqamətində l_0 məsafəsini gedirsə, maqnit təsir edəndə həmin τ müddətində l_0 -dan kiçik olan l_x məsafəsini gedir. Deməli, ikinci halda elektrik yükünün köçürülməsinə əlavə müqavimət göstərilir. Bu isə keçiriciliyin azalması və ya xüsusi müqavimətin artması deməkdir.

Sonlu kristalda maqnetorezistivliyin yaranma səbəbini izah edərkən bir cəhət örtülü qaldı. Biz yuxarıda göstərmişdik ki, Holl sahəsi öz qərarlaşmış qiymətini aldıqdan sonra onun yükdaşıyıcılara göstərdiyi təsir maqnit sahəsinin təsirini neytrallaşdırır və yükdaşıyıcılar artıq düzxətli trayektoriyalarından meyl etmir. Onda maqnit sahəsində yarımqəricinin xüsusi müqaviməti dəyişməməlidir, lakin bu mülahizələr hər hansı orta sürətlə hərəkət edən elektronlar (və ya deşiklər) üçün doğrudur. Çünki Holl sahəsi maqnit sahəsinin təsirini yükdaşıyıcıların sürətlərinin bir orta qiymətinə görə tarazlayır, ancaq Holl sahəsi tərəfindən bütün elektronlara (və ya deşiklərə) təsir edən qüvvə eyni ($\vec{F}_h = -e\vec{E}$) olduğu halda, maqnit sahəsinin təsiri hər bir elektronun (və ya deşiyin) sürətindən asılıdır:

$$\vec{F}_i = -e[\vec{v} \vec{B}].$$



Şəkil 4.11. n və p -tip kristallarda maqnit sahəsinin təsiri ilə cərəyanın istiqamətinin meylı

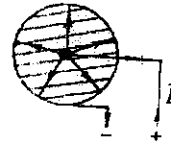


Şəkil 4.12. Maqnit sahəsinin təsiri ilə yükdaşıyıcıların hərəkət trayektoriyasının əyilməsi və Holl bucağının yaranması

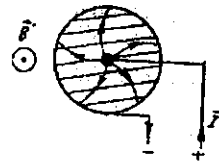
Deməli, orta sürətlə (\bar{v}_m) hərəkət edən elektronlar maqnit sahəsində doğrudan da meyl etməyəcək. Orta sürətdən böyük sürətə malik olan elektronlar üçün $|\vec{F}_i| > |\vec{F}_n|$ və 4.8.-ci şəkildə baxdığımız hal üçün onlar paralelepipedin alt üzünə doğru meyl edəcək, orta sürətdən kiçik sürətlə hərəkət edən elektronlar üçün isə $|\vec{F}_i| < |\vec{F}_n|$ -dur və onlar üst üzə doğru meyl edəcək. Hər iki halda sərbəst yolun x oxu üzrə proyeksiyası kiçiləcək. Deşiklər üçün də mənzərə buna uyğun olacaq. Deməli, sonlu kristalda Qauss effektinin yaranmasında bütün yükdaşıyıcılar deyil, yalnız sürəti orta sürətdən fərqli olan yükdaşıyıcılar iştirak edir, sonsuz kristalda isə bütün yükdaşıyıcılar iştirak edir. Bu o deməkdir ki, Qauss effekti sonsuz kristalda daha təsirlidir. Əlbət ki, təcrübədə sonsuz kristaldan istifadə etmək mümkün deyil, ancaq elə model düzəltmək olar ki, o, sonsuz kristal kimi əvəz etsin. **Korbino diski** buna misal ola bilər. **Qalınlığı**

radiusuna nisbətən nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik olan diskin xarici çevrəsini bütünlüklə və mərkəzini isə nöqtəvi omik kontakla təmin etdikdən sonra onlardan birini (məsələn, mərkəzini) müsbət, digərini isə mənfi qütbə birləşdirək. Bu halda diskdə cərəyan xətləri (və eləcə də yükdaşıyıcıların hərəkət istiqaməti) hər bir nöqtədə radius istiqamətində olub, diskin mərkəzindən kənarına doğru yönəlmiş olacaq (şəkil 7.7). Diskin müstəvisinə perpendikulyar istiqamətdə yönəlmiş maqnit sahəsi ilə ona təsir etsək, cərəyan xətləri və eləcə də yükdaşıyıcıların hərəkət trayektoriyası 7.8-ci şəkildə göstərildiyi kimi əyiləcək (sadəlik üçün 7.7-ci şəkildə səpilmələrin yükdaşıyıcının trayektoriyasında yaratdığı dəyişikliyi nəzərə almamışıq). Şəkildə maqnit sahəsi şəkil müstəvisindən bizə doğru yönəlmişdir. Aydın ki, maqnit və elektrik sahələrindən birinin istiqamətini dəyişdikdə cərəyan xətlərinin də əyriliyi öz istiqamətini

dəyişir. Bunu sol əl qaydasını tətbiq etməklə asanlıqla görmək olar. Korbino diskində hər bir yükdaşıyıcıya o, diski tamamilə tərk edənə qədər maqnit sahəsi tərəfindən meyl etdirici qüvvə təsir edir və yükdaşıyıcıların heç bir yerdə toplanması baş vermir, yəni mənzərə sonsuz kristaldakı kimi olur.



Şəkil 4.13. Maqnit sahəsi olmayan halda Korbino diskində cərəyan xətləri



Şəkil 4.14. Diskin müstəvisinə perpendikulyar yönəlmiş maqnit sahəsi halında cərəyan xətləri

Qauss effekti yürekliyi böyük olan maddələrdə daha təsirli olur. Bunu təqribi hesablama yolu ilə asanlıqla göstərmək olar. 4.12-ci şəkildən:

$$l_x = l_0 \cos \varphi = l_0 \left(1 - 2 \sin^2 \frac{\varphi}{2}\right) \approx l_0 \left(1 - \frac{\varphi^2}{2}\right) = l_0 \left(1 - \frac{\mu_k^2 B^2}{2}\right), \quad (4.6.23)$$

burada φ bucağı kiçik olduğu üçün $\sin \varphi \approx \varphi$, $\operatorname{tg} \varphi \approx \varphi$ götürdük, (4.6.21)-dən istifadə etdik. Elektrik keçiriciliyinin nisbi dəyişməsini tapaq:

$$\frac{\sigma_0 - \sigma}{\sigma_0} = \frac{en\mu_0 - en\mu_x}{en\mu_0} = \frac{\frac{v_0}{|\vec{E}|} - \frac{v_x}{|\vec{E}|}}{\frac{v_0}{|\vec{E}|}} = \frac{l_0 - l_x}{l_0} = \frac{l_0 - l_x}{l_0} = \frac{\mu_k^2 B^2}{2}. \quad (4.6.24)$$

Eyni qayda ilə müqavimətin:

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \sim \mu_k^2 B^2 \quad (4.6.25)$$

olduğunu göstərə bilərik. Doğrudur, bu hesablamamızın dəqiqliyi çox azdır, ancaq o, göstərir ki, effekt yürekliyədən asılıdır və onun təsirli olması üçün \vec{B} -nin qiyməti böyük olmalıdır.

3. Ettiinqshauzen effekti. Qeyd etdik ki, Holl sahəsi maqnit sahəsinin təsirini orta hesabla tarazlaşdırır, lakin yükdaşıyıcıların sürətə görə paylanması (məsələn, cırılma olmadıqda bu paylanma Bolsman və ya Maksvel paylanmasıdır) mövcud olduğu üçün sürəti orta sürətdən böyük və kiçik olan yükdaşıyıcılar bir-birinin əksinə doğru meyl edir. Bunu izah etmək üçün 4.14-cü şəkildə kristalın *xoz* müstəvisi ilə kəsiyi və sxematik olaraq müxtəlif sürətə malik olan üç elektronun hərəkəti göstərilmişdir. İkinci elektronun sürəti orta sürətə bərabərdir:

$$v_2 = v_0,$$

birinci elektronun sürəti orta sürətdən böyük ($v_1 > v_0$), üçüncününkü isə kiçikdir ($v_3 < v_0$). Elektrik və maqnit sahələrinin şəkildə göstərilən

səmtlənməsində sürəti böyük olan elektron aşağı, kiçik olan isə yuxarı meyl edəcək. Aşağı meyl edən elektronların kinetik enerjisi orta kinetik enerjiden çox, yuxarı meyl edənlərinki isə azdır. Kristal qəfəsi ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində aşağı meyl edən elektronlar öz enerjisinin bir hissəsini kristala verir, yuxarı meyl edənlər isə, əksinə, kristaldan enerji götürür. Beləliklə, *z* oxu istiqamətdə kristalda temperatur qradienti yaranır. 4.14.-cü şəkildə göstərilən halda paralelepipedin alt üzü (T_1) qızır, üst üzü (T_2) isə soyuyur ($T_1 > T_2$). **Bu effekt (nümunədə eninə temperatur qradientinin yaranması) Ettiinqshauzen effekti adlanır.** Elektrik və maqnit sahələrindən birinin istiqamətini dəyişdikdə temperatur qradientinin də istiqaməti dəyişir. Ona görə Ettiinqshauzen

effekti də tək effekt adlanır. Burada yaranan temperatur qradienti cərəyan sıxlığı vektorunun maqnit induksiya vektoruna vektorial hasili ilə mütənasibdir:

$$\frac{\partial T}{\partial z} = A^e [\vec{j} \vec{B}], \quad (4.6.26)$$

burada A^e - Ettingshauzen əmsalı adlanır.

4. Nernst effekti.

Çarpazlaşmış elektrik və maqnit sahəsi təsir etdikdə kristalda cərəyan istiqamətində (uzununa) temperatur qradienti yaranır və bu **Nernst effekti** adlanır. Onun yaranma mexanizmini aydınlaşdırmaq.

(4.6.4)-dən görüldüyü kimi, maqnit sahəsinin yaratdığı dairəvi hərəkətdə

radiusun qiyməti $r = \frac{v}{\omega_c}$

yükdaşıyıcının sürəti ilə mütənasibdir (ω_c sabitdir). Onda sürəti böyük olan elektronlar trayektoriyasının əyilməsi az

olduğu (radiusu böyükdür) üçün iki ardıcıl toqquşma zamanı nümunənin bir tərəfindən o biri tərəfinə doğru (cərəyan istiqamətində) öz yerini daha çox dəyişər. Sürəti kiçik olan elektronlar isə fırlanma radiusları kiçik olduğu üçün trayektoriyalarının daha çox əyilməsi üzündən iki ardıcıl toqquşma arasında kiçik yerdəyişmə etmiş olur. Beləliklə, cərəyan istiqamətində temperatur qradienti yaranmış olur.

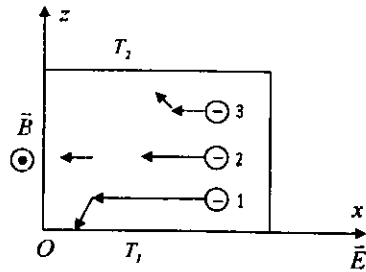
Nernst effekti maqnit sahəsinin istiqamətindən asılı deyil, onu da cüt effekt adlandırmaq olar.

Bu halda:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = A^n B_y^2 j_x, \quad (4.6.27)$$

burada A^n -Nernst əmsalı adlanır.

Nəhayət, qeyd etmək lazımdır ki, qalvanomaqnit effektlər izotermik və adiabatik olur. Tədqiq olunan kristal xarici mühitlə istilik mübadiləsində olursa, effekt izotermik (eninə temperatur qradienti sıfıra bərabərdir), olmur - adiabatik adlanır. Əslində adiabatikliyin verdiyi əlavə çox kiçik olur. Holl, Qauss və Nernst effektlərinə izotermik halda baxmaq əlverişlidir (hesablamalar sadə olur), Ettingshauzen effektinə isə



Şəkil 4.15 Çarpaz yönəlmiş elektrik və maqnit sahələrinin təsiri altında kristalın üst və alt səthləri arasında temperatur qradientinin yaranması

adiabatik şəraitdə baxmaq tələb olunur, əks halda onu müşahidə etmək mümkün deyil.

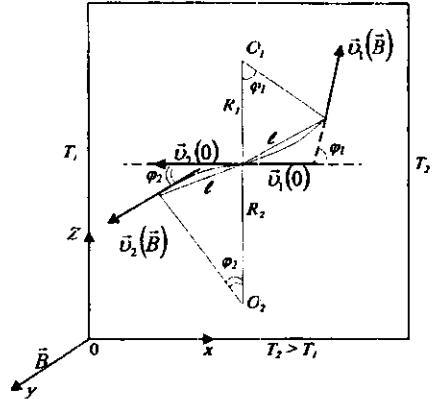
§ 4.7. Termomaqnit effektlər

Temperatur qradienti (və deməli, termoelektrik sahəsi) olan kristala eyni zamanda xarici maqnit sahəsi də təsir edirsə, elektrik cərəyanının sıfıra bərabər olduğu şəraitdə kristalda baş verən hadisələr **termomaqnit effektləri** adlanır. Bu şəraitdə dörd müxtəlif effekt müşahidə olunur. Onların yaranmasının fiziki əsası hərəkət edən yükdaşıyıcıların maqnit sahəsi ilə qarşılıqlı təsirdə olması, başqa sözlə, Lorents qüvvəsinin yükdaşıyıcıların sürətindən xetti asılı olmasıdır. Əvvəlcə termomaqnit effektlərin yaranma mexanizmlərinin fiziki menzərəsi ilə müfəssəl tanış olaq.

1. **Eninə Nernst – Ettingşhauzen effekti.** Tutaq ki, düzbucaqlı paralelepiped şəklində olan kristalda temperatur qradienti yaradılmışdır və ona temperatur qradientinə perpendikulyar istiqamətdə maqnit sahəsi təsir edir. Yəne də düzbucaqlı

koordinat sisteminin başlanğıcını paralelepipedin təpə nöqtələrindən birində seçək və koordinat oxlarını onun tilləri üzrə yönəldək. Temperatur qradientini x maqnit sahəsini isə y oxu istiqamətdə götürək. Maqnit sahəsi olmadıqda temperatur qradientinin təsiri ilə yükdaşıyıcıların diffuziyası nəticəsində nümunədə termoelektrik sahəsi yaranır və dinamik tarazlıq halında yükdaşıyıcıların kristalın həcmində paylanması elektrik cərəyanının sıfıra bərabər olmasını təmin edir. Bunu sadə şəkildə belə təsəvvür edə bilərik ki, temperaturu kiçik olan oblastdan kristalın vahid həcmindən n_1 sayda elektron (və ya

deşik) hər hansı orta v_1 sürəti ilə temperatur qradienti istiqamətində (termoelektrik sahəsinin təsiri ilə) hərəkət edir, temperaturu böyük olan oblastdan isə vahid həcmdən n_2 elektron v_2 orta sürəti ilə temperatur qradientinin əksinə hərəkət edir. Hər iki istiqamətdə axan elektrik cərə-



Şəkil 4.16. Maqnit sahəsinin təsiri ilə bir-birinə əks istiqamətdə hərəkət edən müxtəlif sürətli elektronların meyli

yanı qiymətcə eynidir. Ona görə

$$en_1v_{1x}^{(0)} = en_2v_{2x}^{(0)}, \text{ yaxud } n_1v_{1x}^{(0)} = n_2v_{2x}^{(0)}. \quad (4.7.1)$$

Maqnit sahəsinə qoşduqda x oxu üzrə bir-birinin əksinə hərəkət edən elektronlar maqnit sahəsinin təsiri ilə z oxu üzrə müxtəlif istiqamətlərdə meyl edəcək. Burada səpilmə mexanizmi mühüm rol oynadığı üçün konkret hala baxaq. Deyək ki, aşqar keçiriciliyinə malik olan n -tip yarımqeçiricidə elektronlar kristal qəfəsinin akustik rəqslərindən səpilir. Bu hal üçün 4.16-cı şəkildə x oxu üzrə müxtəlif istiqamətdə hərəkət edən iki elektronun maqnit sahəsinin təsiri ilə meyli göstərilmişdir. Şəkildə nümunənin xoz müstəvisi ilə kəsiyi verilmişdir. $v_1 < v_2$ -dir, «soyuq» elektronlar yuxarı, «isti» elektronlar isə aşağı doğru meyl edir. İki ardıcıl toqquşma arasındakı l məsafəsinə (yada salaq ki, akustik rəqslərdən səpilmədə l yükdaşıyıcıların sürətindən asılı deyil) müxtəlif sürətli elektronlar müxtəlif τ müddətində qət edir. Ona görə də maqnit sahəsi onları müxtəlif bucaq altında meyl etdirir. Zəif maqnit sahəsində meyl bucağı kiçik olduğu üçün bucağın tangensini elə özünə bərabər götürə bilərik:

$$\operatorname{tg} \varphi \approx \varphi = \frac{l}{R} = \frac{v\tau}{\left(\frac{m^*v}{eB}\right)} = \left(\frac{eB}{m^*}\right)\tau = \omega_c\tau, \quad (4.7.2)$$

burada ω_c - siklotron tezliyi sabit olduğu üçün meyl bucağı yalnız relaksasiya müddətindən asılıdır. 4.16-cı şəkildən görüldüyü kimi, maqnit sahəsi qoşulduqdan sonra v_1 sürəti ilə hərəkət edən elektronların sürətində z oxu istiqamətində, əks istiqamətdə hərəkət edən («isti») elektronların v_2 sürətində isə z oxunun mənfi istiqamətində toplananı yarandı, yəni «soyuq» elektronların z istiqamətində, «isti» elektronların isə z oxunun əksi istiqamətdə axını yarandı. Bu cərəyan:

$$\begin{aligned} I_z &= -e(n_1v_{1z}(B) - n_2v_{2z}(B)) = -e(n_1v_1(B)\sin\varphi_1 - n_2v_2(B)\sin\varphi_2) \approx \\ &\approx -e\bar{n}\bar{v}_x(\varphi_1 - \varphi_2) = -e\bar{n}\bar{v}_x\omega_c(\tau_1 - \tau_2). \end{aligned} \quad (4.7.3)$$

Bu düsturu çıxararkən səpilmə elastik olduğu üçün $|\bar{v}(0)| = |\bar{v}(\bar{B})|$ olduğunu və (4.7.1)-u nəzərə alıb, $n_1v_1(B) = n_2v_2(B) = n\bar{v}_x$ orta qiymətlə əvəz etdik. Deməli, maqnit sahəsi qoşulduqda z istiqamətdə yaranan cərəyanın qiymət və istiqaməti «soyuq» və «isti» elektronların meyl bucaqlarının fərqindən və ya relaksasiya müddətlərinin fərqindən asılıdır.

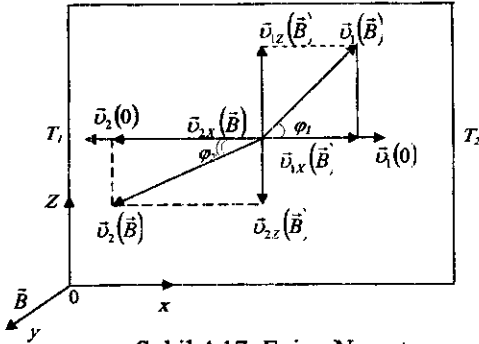
Öyanilik üçün bu elektronların sürətlərinin x və z komponentlərinə ayrılması 4.17.-ci şəkildə göstərilmişdir. Aydınır ki, bu halda paralelepipedin z istiqamətindəki üzlerinden birində elektronların artıqlığı, digərində isə çatışmazlığı yaranacaq, yeni z istiqamətdə yeni elektrik sahəsi meydana çıxacaq. Sahənin qiyməti o vaxta qədər böyüyəcək ki, onun əks istiqamətdə yaratdığı cərəyan maqnit sahəsinin təsirini tarazlaşdırsın. **Bu hadisə eninə Nernst-Ettingshauzen effekti, yaranmış elektrik sahəsi (\vec{E}_z^{Ne}) isə Nernst-Ettingshauzen sahəsi adlanır.** Qərarlaşmış halda:

$$\vec{I}_z + \sigma_{xx} \vec{E}_z^{Ne} = 0, \quad (4.7.4)$$

burada σ_{xx} -maqnit sahəsi təsir etdikdə nümunənin z istiqamətdə keçiriciliyidir. \vec{E}_z^{Ne} sahəsinin istiqaməti yükdaşıyıcının yükünün işarəsindən və səpil məmexanizmindən asılıdır. Akustik fononlardan səpilmə mexanizmində

$$\tau = \tau_0 E^{-1/2} = \frac{\tau_0}{\sqrt{E}}, \text{ yəni sürəti}$$

(enerjisi) kiçik olan elektronlar üçün relaksasiya müddəti sürəti böyük olan elektronlarından böyükdür. Bu, o deməkdir ki, elektron iki ardıcıl toqquşma arasında eyni l məsafəsini qət edərkən



Şəkil 4.17. Eninə Nernst-Ettingshauza effektinin izahı sxemi

«soyuq» elektronlar «isti» elektronlara nisbətən daha uzun müddətdə maqnit sahəsinin təsirinə məruz qalır. Ona görə də «soyuq» elektronlar öz əvvəlki hərəkət istiqamətindən «isti» elektronlara nisbətən daha böyük bucaq altında meyl edir. Deməli, 4.17.-ci şəkildə $v_{1z}(B) > v_{2z}(B)$ və elektronlar paralelepipedin z istiqamətindəki üst üzünə toplanacaqlar. Bu halda elektronların yaratdığı Nernst-Ettingshauzen sahəsi müsbətdir ($\vec{E}^{Ne} - z$ oxunun müsbət istiqamətinə yönəlib). Əgər elektronların səpilməsi ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən baş verərsə, onda $\tau = \tau_0 E^{3/2}$ (yada salaq ki, bu halda $l \sim E^2$ -dir), yəni sürəti böyük olan elektronlar üçün relaksasiya müddəti də böyükdür. Belə olduqda «isti» elektronlar «soyuq» elektronlara nisbətən daha çox meyl edəcəklər və indi $v_{1z}(B) < v_{2z}(B)$. Deməli, elektronlar paralelepipedin alt üzünə daha çox toplanacaq, yəni Nernst-Ettingshauzen effekti mənfi olacaq. Yarımkəçiricidə əsas yükdaşıyıcılar dəşiklər olduqda yuxarıda vaxtdığımız mühakimələri təkrar etməklə göstərə bilərik ki, dəşiklərin

yaratdığı Nernst-Ettingshauzen sahəsi elektron keçiriciliyində yaranan sahə istiqamətində olacaq. Əlbət ki, bu da öz-özünə aydındır. Çünki hər iki növ yükdaşıyıcının meyletmə istiqaməti və yüklərinin işarəsi müxtəlifdir.

Təcrübədən məlumdur ki, temperatur qradienti və maqnit sahəsinin yuxarıda seçdiyimiz istiqamətləri üçün eninə Nernst-Ettingshauzen sahəsinin intensivliyi temperatur qradienti və maqnit sahəsinin induksiyası ilə düz mütənasibdir və ümumiyyətlə:

$$E_x^{Nc} = A_1^{Nc} B_y \nabla_x T, \quad (4.7.5)$$

burada A_1^{Nc} - mütənasiblik əmsəlidir, onu Nernst-Ettingshauzen əmsəli adlandırırlar. A_1^{Nc} -nin işarəsi effektin işarəsi ilə təyin olunur. Deməli, A_1^{Nc} -nin işarəsi maqnit sahəsinin istiqamətindən və səpilmə mexanizmindən asılıdır. Maraqlı cəhət burasındadır ki, temperaturdan asılı olaraq səpilmə mexanizmi dəyişirsə, onda E_x^{Nc} sahəsinin istiqaməti və A_1^{Nc} -nin işarəsi dəyişir. Bu isə üstünlük təşkil edən səpilmə mexanizminin müəyyən etməyə imkan verir.

2. Uzununa Nernst-Ettingshauzen effekti. Yenə də x oxu istiqamətdə temperatur qradienti olduqda y oxu üzrə yönəlmiş maqnit sahəsinin təsiri ilə x oxu istiqamətdə (uzununa) əlavə elektrik sahəsi yaranır. **Bu hadisə uzununa Nernst-Ettingshauzen effekti adlanır.** Məlumdur ki, temperatur qradienti maqnit sahəsi olmadıqda x oxu istiqamətdə intensivliyi $\bar{E}_x = \alpha \nabla T$ olan termoelektrik sahəsi yadadır. Ona görə də maqnit sahəsinin qoşulması ilə əlavə elektrik sahəsinin yaranması t.e.h.q.-nin dəyişməsinə və ya əlavə t.e.h.q.-nin yaranmasına səbəb olur. Bu effekti təsvir etmək üçün uzununa Nernst-Ettingshauzen əmsəlindən (A_1^{Nc}) istifadə olunur.

$$E_x(B) - E_x(0) = (\alpha(B) - \alpha(0)) \nabla_x T = A_1^{Nc} \alpha(0) B^2 \nabla_x T. \quad (4.7.6)$$

Buradan:

$$A_1^{Nc} = \frac{\Delta \alpha}{\alpha(0)} \cdot \frac{1}{B^2}. \quad (4.7.7)$$

$\alpha(B)$ və $\alpha(0)$ - maqnit sahəsi olduqda və olmadıqda t.e.h.q. $\Delta \alpha$ isə onların fərqi.

Effektin yaranma səbəbini aydınlaşdıraraq. Xarici maqnit sahəsi olmadıqda temperatur qradienti nəticəsində yaranan t.e.h.q.-nin qiyməti temperatur qradienti istiqamətdə və əksinə hərəkət edən yükdaşıyıcıların sürətlərinin fərqindən asılıdır. Maqnit sahəsi qoşulduqda «isti» və «soyuk» elektronlar (və ya deşiklər) əks istiqamətdə müxtəlif bucaqlar altında meyl etdiklərinə görə, 4.17.-ci şəkildən göründüyü kimi, onların sürətlərinin x komponenti müxtəlif cür dəyişiləcək. Bu isə t.e.h.q.-nin dəyişməsinə səbəb olacaq. Aydındır ki, effektin (A_1^{Nc} -nin) işarəsi maqnit

sahəsinin istiqamətindən asılı deyil. Çünki maqnit sahəsinin istiqamətinin dəyişməsi yalnız sürətin z komponentinin istiqamətinin dəyişməsinə səbəb olur, x komponentinin istiqamətinə isə təsir etmir. Effektin ($\Delta\alpha$ -nın) işarəsi yükdaşıyıcının tipindən və səpilmə mexanizmindən asılıdır. Səpilmə mexanizmindən asılılığı əsas yükdaşıyıcıları elektronlar olan yarımkəçirici üçün izah edək. Maqnit sahəsinə qoşduqda elektronun öz əvvəlki istiqamətindən meyl etməsi nə qədər çox olsa, sürətin x komponentinin dəyişməsi də bir o qədər çox olur. Meyl bucağı isə relaksasiya müddəti ilə mütənasibdir (zəif maqnit sahəsində). n -tip kristalda $\alpha(0) < 0$ və t.e.h.q.-nin böyüməsi (mütləq qiymətcə)

$$\alpha(B) - \alpha(0) = \Delta\alpha < 0 \quad (4.7.8)$$

olması deməkdir. Bu isə sürətlərin x komponentlərinin nisbi dəyişməsinin aşağıdakı bərabərsizliyi ödəməsinə tələb edir:

$$\frac{v_{1x}(0) - v_{1x}(B)}{v_{1x}(0)} > \frac{v_{2x}(0) - v_{2x}(B)}{v_{2x}(0)} \quad (4.7.9)$$

Buradan:

$$\frac{v_{1x}(B)}{v_{1x}(0)} < \frac{v_{2x}(B)}{v_{2x}(0)}, \quad (4.7.10)$$

yəni «soyuq» elektronların sürətlərinin x komponentinin nisbi dəyişməsi «isti» elektronlarından böyük olduqda uzununa (x istiqamətdə) potensiallar fərqi artır, deməli, t.e.h.q. böyüyür (mütləq qiymətcə). Bu isə o vaxt mümkündür ki, sürəti kiçik olan elektronlar üçün relaksasiya müddəti sürəti böyük olan elektronlarından böyük olsun. Bu şərt akustik fononlardan səpilmə mexanizmində ödənilir: $\tau = \tau_0 E^{-1/2}$.

n -tip kristal üçün $\Delta\alpha > 0$ olmasını (t.e.h.q.-nin mütləq qiymətcə azalmasını), eyni qayda ilə göstərə bilərik ki,

$$\frac{v_{1x}(B)}{v_{1x}(0)} > \frac{v_{2x}(B)}{v_{2x}(0)} \quad (4.7.11)$$

olduqda mümkündür. Bu şərt ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə mexanizmi üçün ödənilir: $\tau = \tau_0 E^{3/2}$. Sürəti böyük olan elektronlar üçün τ -nin də qiyməti böyükdür, yəni sürətin x komponentinin nisbi dəyişməsi sürəti böyük olan elektronlar üçün sürəti kiçik olan elektronlara nisbətən böyükdür. Bu isə t.e.h.q.-nin mütləq qiymətcə azalmasına səbəb olur.

Eyni mühakimələr p -tip kristal üçün də doğrudur. Lakin bu halda $\Delta\alpha$ -nın işarəsi yuxarıdakının əksinə olacaq.

3. Riği – Ledyuk effekti. Kristalda x oxu istiqamətdə temperatur qradienti yaradıb, ona y oxu istiqamətdə maqnit sahəsi ilə təsir etsək, hər iki sahəyə perpendikulyar istiqamətdə (z istiqamətdə) temperatur qradienti yaranacaq. **Bu hadisə Riği – Ledyuk effekti adlanır.** Yaranan

temperatur qradienti x istiqamətindəki temperatur qradienti və maqnit sahəsinin induksiyası ilə düz mütənasibdir:

$$\nabla_x T = A^{RL} (\nabla_x T) B, \quad (4.7.12)$$

burada A^{RL} – Riçi – Ledyuk əmsali adlanır. (7.20)-dan:

$$A^{RL} = \frac{\nabla_x T}{B \nabla_x T}. \quad (4.7.13)$$

Maqnit sahəsi y oxu üzrə yönəlmiş üçün onu indeksiz yazdıq. Effektiv başvermə səbəbini izah etmək çox asandır. Doğrudan da 4.16.-cı şəkildə gördük ki, maqnit sahəsinin təsiri ilə «isti» və «soyuq» elektronlar z oxu üzrə əks istiqamətlərə meyli edir. Nəticədə paralelepipedin «isti» elektronlar axını yönəlmiş üzünün temperaturu artır, «soyuq» elektronlar axını yönələn üzünün isə temperaturu azalır. Temperatur qradientinin artması o vaxta qədər davam edir ki, onun yaratdığı diffuziya seli elektronların əvvəlki axınını tarazlaşdırır. Maqnit sahəsinin və ümumi istilik keçiriciliyinin z oxu üzrə yaratdıqları enerji selləri bir-birini tarazladıqdan sonra enerji seli sıxlığı vektorunun z komponenti sıfır olur ($\varpi_z = 0$) və onun yalnız x komponenti sıfırdan fərqli qalır: $\vec{\varpi}(\varpi_x, 0, 0)$. Temperatur qradientinin isə həm x və həm də z komponentləri sıfırdan fərqli qalır: $\nabla T = (\nabla_x T, 0, \nabla_z T)$. Ona görə də $\vec{\varpi}$ ilə ∇T arasında müəyyən bucaq əmələ gəlir:

$$\text{tg} \varphi_{RL} = \frac{\nabla_z T}{\nabla_x T}. \quad (4.7.14)$$

(4.7.13)-dən istifadə etsək:

$$\text{tg} \varphi_{RL} = A^{RL} \cdot B. \quad (4.7.15)$$

Bu münasibət Holl effektində aldığımız (4.6.21) ifadəsinə bənzəyir və onunla müqayisədən aydın olur ki, A^{RL} yürüklük vahidləri ilə ölçülür, yəni A^{RL} yükdaşıyıcıların yükünün işarəsindən və səpilmə mexanizmindən asılıdır.

4. Maci - Riçi – Ledyuk effekti. Bu effekt istilik keçiriciliyinin yükdaşıyıcılarının payına düşən hissəsinin dəyişməsi ilə əlaqədardır. 4.17.-ci şəkildən görüldüyü kimi kristalda x istiqamətində temperatur qradienti olduqda ona perpendikulyar istiqamətdə təsir edən maqnit sahəsi həm «isti», həm də «soyuq» elektronların sürətlərinin x komponentinin dəyişməsinə səbəb olur. Nəticədə x oxu istiqamətdə əlavə temperatur qradienti yaranır, yəni enerji selinin qiyməti dəyişir. Enerji selinin dəyişməsi isə yükdaşıyıcıların payına düşən istilik keçiriciliyinin dəyişməsinə ekvivalentdir. Effekt istilikkeçirmənin nisbi dəyişməsi ilə xarakterizə olunur:

$$\frac{\Delta \chi}{\chi_x(0)} = \frac{\chi_x(0) - \chi_x(B)}{\chi_x(0)}. \quad (4.7.16)$$

Bu effekt maqnit sahəsinin istiqamətindən və yükdaşıyıcının növündən asılı deyil, ancaq səpilmə mexanizmindən asılıdır.

§4.8. Termoelektrik effektlər

Maqnit sahəsi olmadıqda kristalda temperatur qradientinin və elektrik sahəsinin təsiri ilə yaranan hadisələr **termoelektrik effektlər** adlanır. Kinetik hadisələrin bu qrupunda üç effekt müşahidə olunur. Əvvəlcə bu effektlərin yaranma mexanizmləri ilə tanış olaq.

1. Zeyebek effekti. İki müxtəlif maddədən düzəldilmiş tam dövredə temperatur qradienti yaratdıqda (yəni kontaktların temperaturları müxtəlif olduqda) cərəyan baş verir. Bu cür dövrəni (şəkil 4.18) hər hansı bir yerindən (kontaktlardan başqa) qırsaq, onda qırılmış yerdəki uclar arasında potensiallar fərqi yaranır. Yaranmış potensiallar fərqi **termoelektrik hərəkət qüvvəsi** (termo-e.h.q. və ya t.e.h.q.) adlanır. Bu effekt ilk dəfə onu müşahidə edən alimin şərəfinə zeebek effekti və ya termoelektrik effekti adlanır. Zeyebek müəyyən etmişdir ki, yaranan potensiallar fərqi ($d\varepsilon_{12}$) kontaktların temperatur fərqiindən və kontaktda olan maddələrin təbiətindən asılıdır:

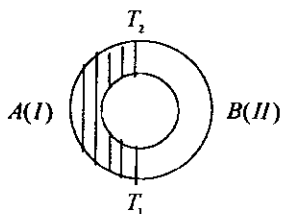
$$d\varepsilon_{12} = \alpha_{12} dT \quad (4.8.1)$$

α_{12} -nin fiziki mənası, düsturdan görüldüyü kimi, kontaktlar arasında temperatur fərqi 1 dərəcə olduqda dövredə yaranan potensiallar fərqi və ya termo-e.h.q.-dir. α_{12} -nin qiyməti kontaktda olan maddələrin təbiətindən asılıdır. O, müsbət və ya mənfi ola bilər. Temperaturu yüksək olan kontaktda müsbət yükdaşıyıcı (deşik) birinci maddədən ikinci maddəyə keçirsə (cərəyan saat əqrəbi istiqamətində axırsa), α_{12} müsbət ($d\varepsilon_{12} > 0$), əks halda mənfi olur. α_{12} iki maddəni birlikdə xarakterizə edir. Onu adətən birinci maddənin ikinci maddəyə nisbətən diferensial termo-e.h.q. adlandırırlar. Kontaktda olan maddələrdən birini dəyişdikdə α_{12} -nin qiyməti də dəyişir, çünki α_{12} maddə cütünü təmsil edir. Sonra görəcəyik ki, diferensial termo-e.h.q. temperaturdan asılıdır. Ona görə dövredə kontaktların ixtiyari temperatur fərqinə uyğun gələn potensiallar fərqi (t.e.h.q.-ni) belə hesablamaq lazımdır:

$$\varepsilon_{12} = \int_{T_1}^{T_2} \alpha_{12}(T) dT \quad (4.8.2)$$

Bunu inteqral termo-e.h.q. adlandırırlar. Termo-e.h.q.-nin yaranmasının iki başlıca səbəbi vardır: a) temperatur qradientinin mövcud olması hesabına yükdaşıyıcıların diffuziyası; b) kimyəvi potensialın (Fermi səviyyəsinin) temperaturdan asılı olması. Temperatur qradienti yükdaşıyıcıların

kristalda temperatur çox olan yerdən az olan yerə diffuziya etməsinə səbəb olur. Yüklərin bu cür təzədən paylanması nəticəsində elektrik sahəsi yaranır və o, yükdaşıyıcıların diffuziyasına əks təsir göstərir. Diffuziya cərəyanı ilə yeni meydana çıxan elektrik sahəsinin əks istiqamətdə yaratdığı cərəyan bir-birinə bərabər olduqda dinamik tarazlıq halı yaranır və bundan sonra sahənin qiyməti sabit qalır. Bundan əlavə, bir sıra hallarda yükdaşıyıcıların konsentrasiyası temperaturdan asılı olur və temperatur fərqi kristalda



Şəkil 4.18. Termoelektrik effektinin müşahidə sxemi

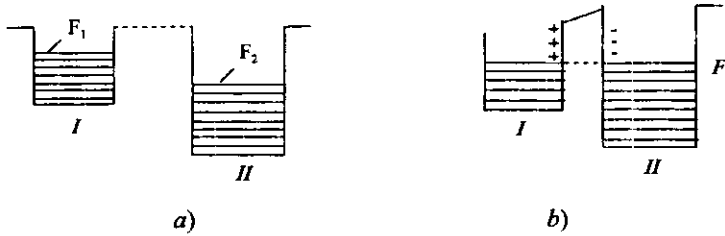
konsentrasiya qradienti yaradır ki, bu da diffuziyayı gücləndirir və nəticədə termoelektrik sahəsinin qiyməti daha da böyük olur. Yarımkəçiricidə iki növ yükdaşıyıcı (elektron və deşik) olduqda zərəciklərin diffuziyası eyni istiqamətdə baş verdiyi üçün elektron və deşiyin yaratmış olduğu sahələrin istiqaməti müxtəlif olacaq və onlar bir-birini tarazlaşdıracaq. Ona görə də bir növ yükdaşıyıcısı olan yarımkəçiricidə diferensial termo-e.h.q. iki növ yükdaşıyıcısı olan yarımkəçiricidəkindən böyük olacaq (mütləq qiymətcə). Bunu biz dəqiq hesablamalar nəticəsində alacağıq.

Termo-e.h.q. yaradan ikinci səbəbi əyani təsvir etmək üçün iki müxtəlif metalın kontaktına baxaq. Şəkil 4.19.a-da bu metallar kontakta gətirilməzdən qabaq onların valent zonalarının və Fermi səviyyələrinin vəziyyəti göstərilmişdir. Şərti olaraq qəbul edək ki, birinci metaldan çıxış işi ikincidən kiçikdir. Onlar kontakta gətirildikdə birinci metaldan ikinci metala elektronların axını əks axından böyük olacaq və ikinci metalın kontakt səthi mənfi, birinci metalınki isə müsbət yüklənəcək. Yaranmış elektrik sahəsi elektronların axınına əks təsir göstərəcək və nəhayət, dinamik tarazlıq alınacaq. Bundan sonra Fermi səviyyəsinin vəziyyəti hər iki metalda eyni olacaq. Burada iki metal arasında yaranmış potensiallar fərqi qənaətdə kontakt (daxili) potensiallar fərqi deyirlər. Onun qiyməti:

$$V_t = \frac{F_1 - F_2}{e} \quad (4.8.3)$$

Buna bənzər mənzərə metal - yarımkəçirici və yarımkəçirici-yarımkəçirici kontaktlarında da baş verəcək. Fərq yalnız ondan ibarətdir ki, metallarda Fermi səviyyəsinin vəziyyəti temperaturdan çox zəif asılıdır, yarımkəçiricilərdə isə bu asılılıq güclüdür.

Əlbət ki, 4.19-cu şəkildəki menzərə hələlik dövredə əlavə potensiallar fərqi yaranacağını göstərmir. Çünki bu cür potensiallar fərqi hər iki kontaktda yaranacaq və onların işarələri bir-birinin əksinə olacaq. Dövredə yekun potensiallar fərqi sıfır olacaq. Ancaq iş burasındadır ki, kontaktların temperaturları müxtəlifdir, Fermi səviyyəsi isə temperaturdan asılıdır. Ona görə də kontaktlarda yaranmış potensiallar fərqi müxtəlifdir və tam dövredə kontaktların olması üzündən əlavə potensiallar fərqi meydana çıxacaq.



Şəkil 4.19. İki müxtəlif metalın kontaktında potensiallar fərqi yaranması

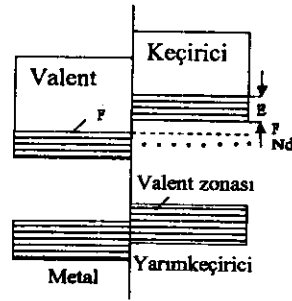
Biz yuxarıda t.e.h.q.-nin iki mexanizmini və ona uyğun iki komponentini araşdırdıq. Aşağı temperaturlarda bir sıra maddələrdə t.e.h.q.-nin üçüncü bir mexanizm idə özünü göstərir. Buna elektronların (və ya dəşiklərin) fononlar tərəfindən sövq olunması deyirlər. Səpilmə proseslərini təhlil edərkən biz fononların paylanma funksiyasını tarazlıq paylanma funksiyası kimi götürürdük. Bəzi hallarda bu yaxınlaşma düzgün olmur. Kristalda temperatur qradientinin və elektrik sahəsinin olması üzündən fononların paylanma funksiyasının simmetriyası pozulur. Bu isə yükdaşıyıcılarla qarşılıqlı təsirdə özünü göstərir. Temperatur qradienti fononların istiqamətlənmiş axınına səbəb olur. Bu axında iştirak edən fononlar toqquşma nəticəsində öz istiqamətlənmiş impulslarının bir hissəsini elektronlara verirlər. Nəticədə elektronların da istiqamətlənmiş axını (diffuziya komponentindən əlavə) yaranır. Elektronların axını o vaxta qədər davam edir ki, meydana çıxan yeni elektrik sahəsi onun təsirini tarazlaşdırmış olsun. Beləliklə, t.e.h.q.-nin üçüncü komponenti yaranmış olur. Fononların nizamlı hərəkəti aşağı temperaturlarda daha təsirli olduğu üçün yükdaşıyıcıların fononlar tərəfindən sövq olunması da aşağı temperaturlarda baş verir. Başqa sözlə, temperatur aşağı düşdükcə elektronla fononun toqquşması da qismən qeyri-elastik olur. Çünki elektronun enerjisi kiçildir və onun fonona verdiyi (və ya aldığı) enerjini nəzərə almamaq olmaz.

2. Peltje effekti (elektrotermik effekt). Kontakta gətirilmiş iki müxtəlif maddədən düzəldilmiş dövrə hissəsindən cərəyan buraxdıqda cfrfyanın istiqamətindən asılı olaraq kontakt yeri ya qızır, ya da soyuyur. Bu hadisə, onu kəşf edən alimin şərəfinə **Peltje effekti** adlanır. Peltje müəyyən etmişdir ki, kontaktda ayrılan və ya udulan istiliyin miqdarı (dQ_{12}) kontaktdan keçən cərəyan şiddəti (I) və onun keçdiyi müddətlə düz mütənasib olub, kontakta gətirilmiş maddələrin təbiətindən asılıdır:

$$dQ_{12} = \Pi_{12} Idt, \quad (4.8.4)$$

burada Π_{12} - mütənasiblik əmsalı kontaktda olan maddələri xarakterizə edir. Ona Peltje əmsalı deyirlər. Cərəyanın bir istiqamətində istilik ayrılırsa (kontakt qızır), əks istiqamətində istilik udulur (kontakt soyuyur). Müəyyən edilmişdir ki, xarici sahənin yaratdığı cərəyan kontaktın temperaturu böyük olan (digər kontakta nisbətən) haldakı termik cərəyan istiqamətində olarsa, Peltje effekti nəticəsində kontakt soyuyur. Bunu enerjinin saxlanması qanununa əsasən izah etmək olar. Termo-cərəyanın mövcud olması üçün kontakta arasıkəsilmədən enerji verilməlidir. Əgər

kontakta xaricdən enerji verilmirsə, cərəyan isə həmin istiqamətdə axırsa, onda kontaktın temperaturu aşağı düşməlidir. Peltje effektinin yaranmasının səbəbi ondan ibarətdir ki, kontaktda olan maddələrdə Fermi səviyyəsinin eyni olmasına baxmayaraq, onlardakı sərbəst yükdaşıyıcıların orta kinetik enerjisi müxtəlifdir. Bu, metal və n -tip yarımkəçiricinin kontaktını sxematik təsvir edən 4.20-ci şəkildən aydın görünür. Cərəyan metaldan yarımkəçiriciyə tərəf axırsa (yəni



Şəkil 4.20. Metal və n -tip yarımkəçiricinin kontaktda enerji səviyyələrinin sxemi

elektronlar yarımkəçiricidən metala doğru hərəkət edir), onda kontakt qızacaq. Çünki yarımkəçiricinin keçiricilik zonasında olan elektronların orta kinetik enerjisi ($\langle E \rangle$) metalda (Fermi səviyyəsində) olan elektronların kinetik enerjisindən böyükdür ($\langle E \rangle > F$). Elektron metala keçən kimi kontaktdan çox kiçik məsafədə qısa müddətdə külli miqdarda toqquşmaya uğrayaraq öz artıq enerjisini metalın kristal şəbəkəsinə verir, özü isə «soyuyub» Fermi səviyyəsinə düşür. Nəticədə kontaktın yaxın oblastında metal qızır. Cərəyanın istiqaməti yarımkəçiricidən metala doğru olduqda (kontaktda elektronlar metaldan yarımkəçiriciyə keçdikdə) isə metaldan yarımkəçiriciyə yalnız o elektronlar keçir ki, onların kinetik enerjisi

mövcud olan potensial çəpərini aşmağa imkan versin. Bu işə enerjisi orta kinetik enerjiden çox olan elektronlardır. Onların metalı tərk etməsi kontakt yaxınlığındakı oblastda metalın soyumasına səbəb olur.

Peltye effektinin izahına başqa səpgidə də yanaşmaq olar. İki müxtəlif maddənin kontaktında, yuxarıda gördüyümüz kimi, termodinamik tarazlıq halında müəyyən elektrik sahəsi mövcuddur. Cərəyan yaradan xarici elektrik sahəsi bu sahənin əksinə yönəlibsə, onda kontakt sahəsinə üstün gəlmək üçün xarici sahə əlavə iş görməlidir. Bu işə kontaktın qızmasına səbəb olacaq. Xarici sahə kontaktdakı sahə ilə eyni istiqamətdə olduqda, o, xarici sahəyə «kömək» edir, onun sərf edəcəyi enerjini qismən əvəz edir. Əlavə enerji kristal qəfəsindən götürüldüyü üçün kontakt soyuyur.

Onu da qeyd edək ki, Zeyebek və Peltye effektləri yalnız kontaktda deyil, kristalın həcmində də baş verə bilər. Bunun üçün kristalın həcmində qeyri-bircins oblastlar mövcud olmalıdır.

3. Tomson effekti (elektrotermik effekt). Qeyri-müntəzəm qızdırılmış kristaldan elektrik cərəyanı keçdikdə kristalda ya Coul-Lens istiliyindən əlavə istilik ayrılır, ya da o soyuyur. **Bu hadisə Tomson effekti adlanır.** Bu effektin yaranmasını başa düşmək çətin deyil. Temperatur qradienti, Zeyebek effektində olduğu kimi, kristalda yükdaşıyıcıların diffuziya nəticəsində yenidən paylanmasına və onun həcmində daxili elektrik sahəsinin yaranmasına səbəb olur. Kristaldan cərəyan buraxdıqda xarici elektrik sahəsinin istiqaməti daxili sahənin əksinə olarsa, onda xarici sahə ona üstün gəlmək üçün əlavə iş görməli olacaq. Bu iş istilik şəklində kristala verilir və onun qızmasına səbəb olur. Bu istilik Coul-lens istiliyindən fərqlidir və onunla toplanıb kristalı daha da çox qızdırır. Xarici sahənin istiqaməti daxili sahə ilə eynidirsə, onda daxili sahə özü iş görür. Bu işə sərf olunan enerji kristaldan götürüldüyünə görə kristal soyuyur. Tomson təcrübə olaraq müəyyən etmişdir ki, ayrılan istiliyin miqdarı cərəyan sıxlığı vektoru və temperatur qradientinin skalyar hasil, kristalın həcmi və cərəyanın keçdiyi müddətlə düz mütənasibdir:

$$dQ^r = -\tau_r (\vec{j} \nabla T) dV dt; \quad dV = S dl, \quad (4.8.5)$$

burada τ_r - mütənasiblik əmsalındır, onu Tomson əmsalı adlandırırlar. sonra görəyik ki, termoelektrik hadisələrini təmsil edən əmsallar arasında müəyyən əlaqə mövcuddur.

§ 4.9. Tenzorezistiv effekt. Tenzohəssaslıq

Mexaniki deformasiya nəticəsində yarımkeçiricinin elektrik müqavimətinin dəyişməsi tenzorezistiv effekt və ya tenzomüqavimət adlanır. Tenzomüqavimət kinetik tənlikdən birbaşa alınmır, amma bu hadisədə kinetik baxımda çox mühüm kəmiyyət – müqavimət dəyişdiyindən, o kinetik hadisələrə aid edilir.

Tenzorezistiv effekti təsvir etmək üçün elastiklik nəzəriyyəsinin bəzi anlayışlarını yadıma salmaq lazımdır. Deformasiya nəticəsində cismin nöqtələrinin koordinatları dəyişir. Əgər deformasiyaya məruz qalana qədər cismin koordinatları \vec{r} , deformasiya olunmuş vəziyyətdə isə \vec{r}' radius vektoru ilə təyin olunursa,

$$\vec{u} = \vec{r}' - \vec{r} \quad (4.9.1)$$

kimi təyin olunan kəmiyyət **deformasiya vektoru** və ya **sürüşmə vektoru** adlanır. \vec{u} vektorunun cismin nöqtələrinin funksiyası - $\vec{U}(\vec{r})$ kimi təyini deformasiya olunmuş cismin halını tamamilə xarakterizə edir. Cismin deformasiyası simmetrik $U_{\alpha\beta}$ - **deformasiya tenzoru** ilə təsvir oluna bilər:

$$U_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right) = u_{\alpha\beta} \quad (4.9.2)$$

Baş oxlarında yazılan deformasiya tenzoru diaqonal şəkə malikdir:

$$U_{\alpha\beta} = u^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} \quad (4.9.3)$$

Deformasiya tenzoru $U_{\alpha\beta}$ deformasiya zamanı cismin nöqtələri arasındakı məsafənin dəyişməsini müəyyən edir.

Əgər deformasiya olunmamış cisimdə iki nöqtə arasındakı məsafə dl , deformasiyaya uğramış halda isə həmin iki nöqtə arasındakı məsafə dl' olarsa, onda deformasiya tenzoru vasitəsilə dl və dl' kəmiyyətləri arasında aşağıdakı kimi əlaqə yaratmaq olar:

$$dl'^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = \sum_{i=1}^3 dx_i^2 \quad (4.9.4)$$

$$dl'^2 = \sum_{i=1}^3 dx_i'^2 = \sum_{i=1}^3 (dx_i + du_i)^2 = \sum_{i=1}^3 (dx_i^2 + 2dx_i du_i + du_i^2) \quad (4.9.5)$$

və

du_i^2 -ni ikinci tərtibdən kiçik kəmiyyət kimi nəzərə almadan, du_i -ni dx_i ilə ifadə edərək

$$du_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j \quad (4.9.6)$$

və (4.9.4)-ü nəzərə alaraq

$$\begin{aligned}
 dl'^2 &= \sum_{i=1}^3 dx_i'^2 = dl^2 + 2 \sum_{i,k=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k = \\
 &= dl^2 + \sum_{i,k} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) dx_i dx_k = dl^2 + 2 \sum_{i,k} u_{ik} dx_i dx_k,
 \end{aligned} \tag{4.9.7}$$

yazırıq. Əgər deformasiya tenzoru (4.9.3) kimi diaqonal şəkildədirsə, onda (4.9.7) ifadəsi sadələşir:

$$dl'^2 - dl^2 = 2 \sum u^{(i)} \delta_{ii} dx_i dx_i = 2 \sum u^{(i)} dx_i^2. \tag{4.9.8}$$

Sonuncu ifadədən

$$dl' = \sqrt{dl^2 + 2 \sum_{i,k} u_{ik} dx_i dx_k} = dl \sqrt{1 + 2 \sum_{i,k} u_{ik} n_i n_k} \tag{4.9.9}$$

alırıq. $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ istiqaməti üzrə nisbi uzanmanı deformasiya tenzoru vasitəsi ilə

$$u = \frac{dl' - dl}{dl} = \sqrt{1 + 2 \sum_{i,k} u_{ik} n_i n_k} - 1 \approx \sum_{i,k} u_{ik} n_i n_k \tag{4.9.10}$$

kimi ifadə etmək olar.

Deformasiya zamanı həcmnin dəyişməsinə tapaq:

$$\begin{aligned}
 d\tau' &= dx' dy' dz' = dx(1 + u^{(1)}) dy(1 + u^{(2)}) dz(1 + u^{(3)}) = \\
 &= d\tau(1 + u^{(1)} + u^{(2)} + u^{(3)}),
 \end{aligned} \tag{4.9.11}$$

və ya

$$\frac{d\tau' - d\tau}{d\tau} = \Delta = \sum_i u^{(i)} = \sum_i u_{ii} = \sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \text{div} \vec{u} \tag{9.12}$$

Beləliklə, deformasiya tenzorunun baş qiymətləri tenzorun baş oxları üzrə nisbi uzanmanı onların cəmi isə həcmnin nisbi dəyişməsinə müəyyən edir.

Aşağıdakı eyniliyi nəzərə alaraq $\{u_a\}$ deformasiya tenzorunu bir qədər başqa cür ifadə etmək olar:

$$u_{ik} = \left[u_{ik} - \left(\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 u_{ii} \right) \delta_{ik} \right] + \left(\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 u_{ii} \right) \delta_{ik}, \tag{4.9.13}$$

Həcmnin nisbi dəyişməsinin üçdə birinə $\left(\frac{1}{3} \Delta \right)$ bərabər olub, eyni

diaqonal elementli diaqonal şəkili ikinci tenzor **hərtərəfli sıxılma tenzoru** adlanır. (4.9.13) ifadəsindəki kvadrat mötərizə içərisindəki hədlə təyin olunan tenzor **sürüşmə tenzoru** adlanır. Onun üçün diaqonal elementlərin cəmi sıfıra bərabər olduğundan, **təmiz sürüşmədə həcmnin dəyişməsi baş vermir**.

Cismin deformasiyası zamanı cisimdə onu tarazlıq, deformasiya olunmamış ilkin vəziyyətə qayıtmağa çalışan daxili gərginliklər meydana çıxır. Onlar hər hansı ikinci rənqli simmetrik tenzor – **gərginlik tenzoru**

$\{P_k\}$ ilə təsvir oluna bilər. P_k kəmiyyəti k oxuna perpendikulyar vahid səthi təsvir edən qüvvənin i oxu üzrə proyeksiyasıdır. Vahid həcmə gəsir edən $\vec{F}^{(i)}$ qüvvəsi \vec{P} gərginlik tenzoru vasitəsi ilə aşağıdakı kimi ifadə oluna bilər:

$$\vec{F}^{(i)} = \text{div } \vec{p}, \quad (4.9.14)$$

$$F_i^{(i)} = \sum_k \frac{\partial p_{ik}}{\partial x_k} \quad (i=1,2,3) \quad (4.9.15)$$

Deformasiya tenzoru ilə gərginlik tenzoru arasında müəyyən əlaqə olmalıdır. Aydındır ki, deformasiyanın artması ilə gərginlik də artmalıdır. Elastiki deformasiya həddində Huk qanununa görə deformasiya ilə gərginlik arasında xətti asılılıq olmalıdır. **Deformasiyanı gərginliklə əlaqələndirən kəmiyyəti, adətən, elastiklik modulu adlandırırlar.** Ümumi halda deformasiya və gərginlik ikinci rəqə tenzorlar olduqlarından, **elastiklik modulu da daha yüksək, məhz dördüncü rəqəli tenzor olmalıdır.** Onun elementlərini λ_{ijkl} ilə işarə edək, $\bar{\lambda}$ tenzorunu **elastiklik modulu tenzoru** və ya **sadəcə elastiklik tenzoru adlandırırlar.** Huk qanununa uyğun olaraq

$$P_{ik} = \sum_{mn} \lambda_{ikmn} u_{,m} \quad (4.9.16)$$

yaza bilərik.

Elastiklik modulu tenzoru $\bar{\lambda}$ özünün indekslər cütünə görə simmetrikdir:

$$\lambda_{ijkl} = \lambda_{jikl} = \lambda_{klij}, \quad (4.9.17)$$

belə ki, o, p_k və u_k kimi iki simmetrik tenzoru öz aralarında əlaqələndirir. Sonuncu ifadəni nəzərə alaraq, ümumi halda $\bar{\lambda}$ tenzorunun 81 elementindən bir-birindən fərqli 21-dən çox elementi ola bilməz. Kristal qəfəsin simmetriya xassəsi nəzərə alındıqda, asılı olmayan elastiklik modullarının sayı kiçilə bilər. Məsələn, triklin sistemdə asılı olmayan modulların sayı 18, romboedrikdə –12, heksaqonolda –5, kubik sistemdə isə yalnız üçdür, onları

$$\lambda_{xxxx}; \lambda_{yyyy}; \lambda_{zzyy} \quad (4.9.18)$$

kimi işarə edək.

İzotrop cisimlər cəmi iki elastiklik modulu – sürüşmə və hərtərəfli sıxılma modulu ilə xarakterizə olunurlar.

Əgər cisim tarazlıqdadırsa, onda vahid həcmə təsir edən yekun qüvvə sıfır bərabərdir, buna görə tarazlıq şərti

$$F_i^{(i)} = \sum_k \frac{\partial p_{ik}}{\partial x_k} = 0 \quad (4.9.19)$$

kimidir. Fərz edək ki, p cismə təsir edən xarici təzyiqdır. Səth elementini dS ilə işarə edək. Xarici qüvvə daxili gərginliklə tarazlaşdıqda

$$p dS_i = p_i dS = \sum_k p_k n_k dS, \quad (4.9.20)$$

şerti ödənilir. $d\bar{S} = \bar{n} dS$ işarə edək, burada \bar{n} cismin səthinin xarici normalıdır. Bu halda

$$p_i dS = \sum_k p_k n_k dS, \quad (4.9.21)$$

və ya

$$p_i = \sum_k p_k n_k, \quad (9.22)$$

alırıq, burada n_k normalın k oxu üzrə proyeksiyasıdır. Hərtərəfli sıxılmada $p_i = -p$ və təzyiğin normal xarakterizə olduğunu nəzərə alaraq,

$$p_k = -p \delta_k \quad (4.9.23)$$

yaza bilərik. Əgər cisim birtərəfli sıxılmaya $\bar{P} = (0, 0, p)$ məruz qalarsa, onda

$$\{P_k\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix} \quad (4.9.24)$$

olar. Təzyiğin $\bar{n} = (n_1, n_2, n_3)$ istiqaməti üzrə təyin olunduğu hal üçün gərginlik tenzoru

$$p_k = -p n_k, \quad (4.9.25)$$

kimidir. p_k və u_k arasındakı (4.9.16) əlaqəsini nəzərə alaraq deformasiyanı xarici gərginlik vasitəsi ilə ifadə etmək olar. Elastiklik modulu tenzoru 81-dən xeyli az komponentə malik olduğu üçün, onun üçün dörd deyil, yalnız iki indeksli işarələnmədən istifadə olunur. Məsələn, kubik kristal halında aşağıdakı işarələmələr daxil edilir:

$$\lambda_{111} \equiv \lambda_{xxx} = c_{11}; \quad \lambda_{112} = c_{12}; \quad \lambda_{121} = c_{21}.$$

c_k komponentləri öz indekslərinə görə simmetrikdirlər. İndi tenzorezistiv effektiv təsvirinə baxaq. Fərz edək ki, yarımqeçirici maddə komponentləri ρ_k^0 olan $\bar{\rho}^0$ xüsusi müqavimət tenzoru ilə xarakterizə olunur. Əgər yarımqeçirici deformasiyaya məruz qalıbsa, onda onun xüsusi müqaviməti dəyişib $\bar{\rho}^T$ və ya ρ_k^T olmuşdur. $\bar{\rho}^T - \bar{\rho}^0$ və ya $\rho_k^T - \rho_k^0$ kəmiyyəti yarımqeçiricidə deformasiya və gərginlik yaradan xarici qüvvənin təsiri nəticəsində xüsusi müqavimətin dəyişməsidir. Xüsusi müqavimətin dəyişməsinə iki cür, ya gərginlik, ya da deformasiya vasitəsi ilə ifadə etmək olar. Gərginliklə deformasiya arasında birqiymətli əlaqə mövcud olduğundan, hər iki üsul ekvivalentdir. Xüsusi müqavimətin $\bar{\rho}^T - \bar{\rho}^0$ dəyişməsinə \bar{P}_k gərginlik tenzoru vasitəsi ilə ifadə edək:

$$\rho_k^T - \rho_k^0 = \rho_k^0 \sum_{tm} \pi_{kltm} \bar{p}_{tm}, \quad (4.9.26)$$

yaxud

$$\rho_k^T = \rho_k^0 \left(1 + \sum_{tm} \pi_{kltm} \bar{p}_{tm} \right) \quad (4.9.27)$$

$$\frac{\rho_k^T - \rho_k^0}{\rho_k^0} = \sum_{tm} \pi_{kltm} \bar{p}_{tm} \quad (4.9.28)$$

Dördüncü rənqli π_{kltm} tenzoru adətən pyezomüqavimət əmsalı tenzoru, yaxud sadəcə pyezomüqavimət tenzoru adlanır.

Kubik kristallik qəfəs üçün pyezomüqavimət tenzoru sadelik üçün iki indeksli kəmiyyətlərlə işarə olunan cəmi üç kəmiyyətə malikdir:

$$\pi_{1111} = \pi_{11}; \quad \pi_{1122} = \pi_{12}; \quad \pi_{1212} = \pi_{44} \quad (4.9.29)$$

(4.9.16)-nı nəzərə alsaq, ρ_k^T -ni deformasiya və elastiklik modulu tenzorları vasitəsi ilə

$$\rho_k^T = \rho_k^0 \left(1 + \sum_{tm} \pi_{kltm} p_{tm} \right) = \rho_k^0 \left(1 + \sum_{tm,jl} \pi_{kltm} \lambda_{lmm} u_{jl} \right) \quad (4.9.30)$$

kimi ifadə edə bilərik.

Tenzorezistiv effektin eksperimental tədqiqində nümunə düzbucaqlı en kəsiyinə malik çubuq şəklində hazırlanıb, birtərəfli sıxılmaya və ya dartılmaya məruz qalır. Əgər cərəyan dartılmaya məruz qalan ox istiqamətində yönəlmişdirsə, uzununa effekt, cərəyan bu oxa (yəni deformasiya yaradan qüvvəyə) perpendikulyar yönəlmişsə, eninə effekt müşahidə olunur.

(4.9.25) ifadəsini nəzərə alaraq, birtərəfli sıxılma halında ($p > 0$) ρ_k^T müqaviməti üçün

$$\rho_k^T = \rho_k^0 \left(1 + \sum_{tm} \pi_{kltm} p_{tm} \right) = \rho_k^0 \left(1 - p \sum_{tm} \pi_{kltm} n_t n_m \right) \quad (4.9.31)$$

yazaq. Fərz edək ki, \vec{j} cərəyanı çubuğun oxu boyunca axır, onda $j_k = j n_k$. Om qanununa görə sahə intensivliyinin E_i komponentlərini tapaq:

$$E_i = \sum_k \rho_k^T j_k = \sum_k \rho_k^0 \left(1 - p \sum_{tm} \pi_{kltm} n_t n_m \right) j n_k \quad (4.9.32)$$

Çubuğun oxu boyu \vec{E} sahə intensivliyini \vec{E}^* ilə işarə edək:

$$E^* = (\vec{E}\vec{n}) = \sum_{i=1}^3 E_i n_i \quad (4.9.33)$$

E^*/j nisbətini ρ^* - uzununa xüsusi müqavimət adlandırmaq:

$$\rho^* = \frac{E^*}{j} = \frac{\sum_i E_i n_i}{j} = \sum_k \rho_k^0 \left(1 - p \sum_{tm} \pi_{kltm} n_t n_m \right) n_k n_i \quad (4.9.34)$$

$p = 0$ olduqda

$$\rho^* = \sum_k \rho_k^0 n_k = \rho_0^* \quad (4.9.35)$$

olur.

$$\pi_i = \frac{\rho^* - \rho_0^*}{\rho_0^* (-p)},$$

π_i yaxud $\pi_{\text{tənzom}}$ kəmiyyəti isə uzununa tenzomüqavimət əmsalı, yaxud gərginliyə görə tenzohəssaslıq adlanır.

Nümunənin oxu boyunca tenzomüqavimət π_i əmsalı vasitəsi ilə

$$\rho^* = \rho_0^* (1 - \pi_i p) \quad (4.9.37)$$

kimi ifadə oluna bilər.

(4.9.36), (4.9.35) və (4.9.34)-dən istifadə edərək, uzununa tenzomüqavimət əmsalı π_i -i pyezomüqavimət tenzoru ilə ifadə edək:

$$\pi_i = \sum_{iklm} \pi_{iklm} n_i n_k n_l n_m \quad (4.9.38)$$

(4.9.29)-u nəzərə almaqla bu cəm asanlıqla hesablanır:

$$\begin{aligned} \pi_i &= \pi_{11}(n_1^4 + n_2^4 + n_3^4) + 2(\pi_{12} + \pi_{44})(n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2) = \\ &= \pi_{11} + 2(\pi_{44} + \pi_{12} - \pi_{11})(n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2). \end{aligned} \quad (4.9.39)$$

Əgər nümunə elə kəsilmişdirsə ki, onun oxu, məsələn, kristalda [100] istiqaməti ilə üst-üstə düşür, onda \vec{n} vektoru sifra bərabər olmayan bir proyeksiyaya malik olur $\vec{n} = (1,0,0)$, bunun nəticəsində

$$\pi_{[100]} = \pi_x = \pi_y = \pi_z = \pi_{11} \quad (4.9.40)$$

alınır. Əgər nümunə [110] istiqaməti üzrə kəsilmişdirsə, onda $\vec{n} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$ və

$$\pi_{[110]} = \frac{\pi_{11} + \pi_{12} + \pi_{44}}{2} \quad (4.9.41)$$

olur. Analoji qaydada

$$\pi_{[111]} = \frac{2}{3}(\pi_{12} + \pi_{44}) + \frac{\pi_{11}}{3} \quad (4.9.42)$$

almaq olar. Beləliklə, gərginliyə görə tenzohəssaslıq əmsalı π_i (4.9.39) ifadəsinə uyğun olaraq, nümunənin oxunun kristalın oxlarına nəzərən istiqamətindən asılıdır.

\vec{u} -ox üzrə deformasiyaya görə S_i tenzohəssaslıq əmsalını daxil edək. Məlumdur ki, Yunq modulu E^y

$$-p = E^y u \quad (4.9.43)$$

münasibətindən təyin olunur, burada (4.9.10)-a uyğun olaraq

$$u = \sum_k \vec{u}_k n_i n_k \quad (4.9.44)$$

(4.9.43)-ü (4.9.37)-də nəzərə alsaq

$$\rho^* = \rho_0^*(1 - p\pi_i) = \rho_0^*(1 + E^y \pi_i u) = \rho_0^*(1 + S_i u) \quad (4.9.45)$$

və ya

$$S_i = \frac{\rho^* - \rho_0^*}{u\rho_0^*} = \pi_i E^y \quad (4.9.46)$$

alırıq. Qeyd etmək lazımdır ki, (4.9.43)-lə təyin olunan Yunq modulu E^y istiqamətindən asılıdır. Onu (4.9.25) və (4.9.10)-a uyğun olaraq elastiklik modulu tenzoru vasitəsi ilə aşağıdakı kimi ifadə etmək olar.

$$-p = \sum p_{ik} n_i n_k = E_n^y \sum u_{ik} n_i n_k \quad (4.9.47)$$

(4.9.16)-ya uyğun olaraq p_{ik} -ni u_{ik} -lə işarə edərək

$$\frac{1}{E_n^y} = \frac{u}{-p} = \frac{\sum_{ik} u_{ik} n_i n_k}{\sum_{iklm} \lambda_{iklm} u_{lm} n_i n_k}, \quad (4.9.48)$$

yaxud

$$\frac{1}{E_n^y} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})} + \left(\frac{1}{c_{44}} - \frac{2}{c_{11} - c_{12}} \right) (n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2) \quad (4.9.49)$$

alırıq. Məsələn, [100] oxu istiqamətində $n = (1, 0, 0)$ üçün Yunq modulu

$$E^y = \frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11} - c_{22}} (c_{11} + 2c_{22}) = E_{[100]}^y \quad (4.9.50)$$

olur.

Yarımqeçiricilərdə tenzohəssaslıq metallardakına nəzərən onlarca dəfə yüksəkdir. Məsələn, xüsusi müqaviməti $0,1 \text{ Om} \cdot \text{sm}$ olan p -silisiumda S_i -in qiyməti 125-ə çatır (nisbi deformasiyaya görə tenzohəssaslıq ölçüsüz kəmiyyətdir), bu da məftil tenzometrlər üçün uyğun kəmiyyətdən təxminən altmış dəfə böyükdür.

§ 4.10. Tenzorezistiv effekt. Pyezomüqavimət əmsalları

Cədvəl -də germanium və silisium üçün pyezomüqavimət əmsallarının bir sıra təcrübi qiymətləri verilmişdir.

Cədvəldən görüldüyü kimi pyezomüqavimət və tenzohəssaslıq əmsalları S_i və π_i keçiriciliyin qiyməti və tipindən, eləcə də temperatur və deformasiyadan asılıdır. Bu asılılığın mahiyyətini başa düşmək üçün tenzorezistiv effektin fiziki təbiətini araşdırmaq lazımdır. Ümumi halda xüsusi müqavimət tenzorunu yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və yürüklük tenzoru $\bar{\mu}$ ilə ifadə etmək olar:

$$\bar{\rho}^{-1} = e n \bar{\mu} = \bar{\sigma} \quad (4.10.1)$$

$\bar{\rho}$ və ya $\bar{\sigma}$ -nın dəyişməsi yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və yürüklüyünün dəyişməsi ilə əlaqədardır.

Pyezomüqavimətin adiabatik əmsalları (T=293K).

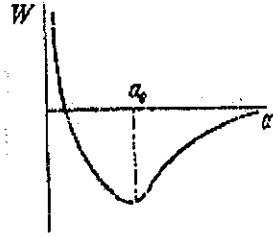
Maddə <i>n</i> -tip	ρ_0	π_{11}	π_{12}	π_{44}	$\pi_t = \pi_{1111}$	E_{1111}^*	$S_{1111} = E_{1111}^* \cdot \pi_{1111}$
	<i>Om · m</i>	(m ² / N -larla)				<i>N / M</i>	
<i>p</i> -tip	0,015	-23	-32	-1381	-949	1,55 · 10 ⁹	-147
	0,057	-27	-39	-1368	-947		-147
	0,099	-47	-50	-1379	-969		-150
	0,166	-52	-55	-1387	-1012		-157
	0,011	-37	32	967	654		101,5
Silisiu <i>m</i> <i>n</i> -tip	0,15	106	50	465	314		48,7
	0,078	66	-11	1381	936	1,87 · 10 ⁹	175
	0,117	-1022	534	-136	-813		-142

1. Həcmi sıxılma. Tenzomüqavimətin meydana gəlməsinin ən sadə halı həcmi və ya hərtərəfli sıxılmadır. Deformasiya tenzoru skalyara cırlaşır: $u_{ii} = u$ kristalın qəfəs sabiti a_0 kiçilir:

$$a' = a_0(1 - u) \quad (4.10.2)$$

Atomlararası məsafənin kiçilməsi ilə elektronların dalğa funksiyalarının bir-birini örtməsi artır, atomların qarşılıqlı təsirini xarakterizə edən $W(a)$ potensial enerji dəyişir. Əgər $W(a)$ -nin minimum qiymətinin $a = a_0$ nöqtəsinə uyğun olduğunu hesab etsək, onda sıxılmada $W(a)$ artır, belə ki, kristal sıxıldıqda (şək. 4.21) $W(a)$ -nın dəyişməsi və dalğa funksiyalarının bir-birini örtməsini nəzərə alaraq belə nəticəyə gəlmək olar ki, kristal sıxıldıqda kvazibağlı elektron yaxınlaşmasında daxil edilmiş mübadilə inteqralı $A(s)$ və enerji səviyyəsinin enməsinə uyğun kəmiyyət c dəyişir. Bu isə öz növbəsində qadağan və enerji zonalarının dəyişməsinə gətirib çıxarır.

Qadağan zonasının dəyişməsi elektron və deşiklərin konsentrasiyasının dəyişməsinə səbəb olmalıdır. Təzyiqin dəyişməsi nəticəsində qadağan zonasının nisbi dəyişməsini β ilə işarə edək:



Şəkil 4.21. Kristalda atomların qarşılıqlı təsir enerjisinin atomlararası məsafədən asılılığı

$$\beta = -\frac{1}{\Delta E_0} \frac{\partial \Delta E_0}{\partial p}; \quad \Delta E_0(p) = \Delta E_0(1 - \beta p). \quad (4.10.3)$$

Əgər deformasiya nəticəsində qadağan zonasının eninin nisbi dəyişmə əmsalını γ ilə işarə etsək:

$$\gamma = \frac{1}{\Delta E_0} \frac{\partial \Delta E_0}{\partial u}; \quad \Delta E_0(u) = \Delta E_0(1 + \gamma u) \quad (4.10.4)$$

yaza bilərik, onda (4.10.4), (4.10.3) və (4.9.43)-dən

$$\beta = \frac{\gamma}{E'} \quad (4.10.5)$$

alırıq. Buradan görünür ki, qadağan zonasının eninin dəyişməsi keçirici zonasının dibinin və valent zonasının tavanının sürüşməsinin nəticəsidir. Bu zaman nəzərə almaq lazımdır ki, E_c və E_v səviyyələrinin sürüşməsi müxtəlif cür baş verə bilər. Ümumi halda E_c və E_v səviyyələrinin vəziyyəti həcmnin nisbi dəyişməsi və ya deformasiya tenzorunun funksiyasıdır:

$$E_c(\bar{u}) = E_c + \frac{\partial E_c}{\partial \bar{u}} \bar{u} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_c}{\partial \bar{u}^2} \bar{u}^2 + \dots \quad (4.10.6)$$

Kiçik deformasiyaları nəzərə almayıb, ilk hədlərlə kifayətlənsək,

$$E_c(\bar{u}) = E_c(0) + \Delta_c \bar{u} \quad (4.10.7)$$

alırıq. Deformasiya olunmuş qəfəsdə elektronun əlavə potensial enerjisi deformasiya potensialı, Δ_c isə deformasiya potensialı sabiti adlanır. Analoji şəkildə valent zonasının tavanı üçün də aşağıdakı ifadəni yaza bilərik:

$$E_v(\bar{u}) = E_v(0) + \Delta_v \bar{u}. \quad (4.10.8)$$

Deformasiya zamanı qadağan zonasının eninin dəyişməsinə

$$\Delta E_0(\bar{u}) = E_c(\bar{u}) - E_v(\bar{u}) = \Delta E(0) + (\Delta_c - \Delta_v) \bar{u} \quad (4.10.9)$$

kimi yaza bilərik. Başqa sözlə γ kəmiyyətini Δ_c və Δ_v ilə ifadə etmək olar. Yükdaşıyıcıların konsentrasiyaları hasilini deformasiya tenzoru ilə ifadə edək:

$$\begin{aligned} np = n_i^2 &= N_c N_v e^{-\frac{\Delta E_0(\bar{u})}{k_c T}} = n_i^2(0) e^{-\frac{(\Delta_c - \Delta_v)\bar{u}}{k_c T}} = \\ &= n_i^2(0) \left(1 - \frac{\Delta_c - \Delta_v}{k_c T} \bar{u} + \dots \right). \end{aligned} \quad (4.10.10)$$

Beləliklə, elektron və deşiklərin hasilinin artımı deformasiya potensialı sabiti və deformasiya tenzorundan asılıdır. Məxsusi yarımkeçiricidə $n = p$ və

$$\frac{\delta n}{n(0)} = \frac{\delta n_i}{n_i(0)} = \frac{\Delta v - \Delta c}{2k_c T} \bar{u} = \frac{\delta p}{p(0)}. \quad (4.10.11)$$

Keçiriciliyin ifadəsini nəzərə alaraq

$$\frac{\delta \rho}{\rho_0} = -\frac{\delta n}{n} = \frac{\Delta_c - \Delta_v}{2k_0 T} \bar{u} = \frac{\Delta_v - \Delta_c}{2k_0 T} \frac{p}{E'} \quad (4.10.12)$$

yazmaq olar. (4.10.12)-ni (4.9.36) ilə müqayisə etsək, uzununa piezomüqavimət əmsalı üçün

$$\pi_t = \frac{\Delta_c - \Delta_v}{2k_0 T E'}; \quad S_t = \frac{\Delta_c - \Delta_v}{2k_0 T} \quad (4.10.13)$$

alırıq. (4.10.13) ifadəsinə görə π_p -in qiymətləndirilməsi hərtərəfli sıxılma halında müqavimətin dəyişməsi üçün nisbətən kiçik qiymətlər verir. (4.10.13) ifadəsinə görə hərtərəfli sıxılma ümumi halda tərkib hissəsi kimi təmiz sürüşmədən əlavə istənilən deformasiyaya daxil olduğundan, hərtərəfli sıxılma nəticəsində sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsi bütün hallarda müşahidə olunmalıdır.

2. Birtərəfli sıxılma və ya dartılma. Gərginlik tenzoru (4.9.24), yaxud (4.9.25) şəklində olduqda birtərəfli sıxılma və ya dartılmada daha böyük tenzomüqavimət müşahidə olunur. Cismin deformasiyası zamanı deformasiya tenzoru \bar{u}_μ ilə təyin olunur. Qeyd etmək lazımdır ki, sıxılma istiqamətində atomlararası məsafə kiçildiyi halda, eninə istiqamətində bu məsafələr artır. Bu amil müxtəlif istiqamətlər üzrə atomların funksiyalarının bir-birini örtmə xarakterinə müxtəlif cür təsir edir.

Keçirici zonanın dibinin vəziyyətini

$$E_c(\bar{u}) = E_c(0) + \sum_{\mu} \Delta_{\mu}^{(c)} u_{\mu} \quad (4.10.14)$$

kimi ifadə edək, burada u_{μ} - deformasiya tenzorunun komponentləri, $\Delta_{\mu}^{(c)}$ isə deformasiya potensialı əmsalı tenzorunun komponentləridir. (4.10.14) ifadəsi kiçik deformasiya hallarında doğrudur. Bu məsələni M sayda minimuma (vadiyə) malik yarıнкеçirici üçün ümumiləşdirək. Fərz edək ki, hər vadiyə (ν - vadi) keçirici zonanın dibinin vəziyyəti öz tenzoru vasitəsi ilə təsvir olunur $\Delta_{\mu}^{(c)(\nu)} = \Delta_{\mu}^{(\nu)}$:

$$E_c^{(\nu)}(\bar{u}) = E_c(0) + \sum_{\mu} \Delta_{\mu}^{(\nu)} u_{\mu}. \quad (4.10.15)$$

Bütün vadilər üçün deformasiya tenzoru eyni, ümumiyyətlə desək, $\Delta^{(\nu)}$ isə müxtəlif olduğundan, **keçirici zonanın dibi hər vadiyə müxtəlif cür sürüşür**. Fermi səviyyəsinin vəziyyəti vadinin nömrəsindən asılı deyil, ona görə Fermi səviyyəsi ilə zonanın dibi arasında məsafə müxtəlif olur, bu da hər bir vadiyə elektronların konsentrasiyasının müxtəlif olmasına gətirib çıxarır: əgər vadinin dibi qalxarsa, ondakı elektronların sayı azalır; yox əgər vadinin dibi enərsə, ondakı elektronların sayı da artır:

$$n^{(\nu)} = N_c e^{\frac{F - E_c^{(\nu)}(\bar{u})}{kT}} = n^{(\nu)}(\bar{u}) \quad (4.10.16)$$

F - deformasiya olunmuş kristalda Fermi səviyyəsidir:

$$F' = F + \delta F; \quad \delta F = \sum_{\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}. \quad (4.10.17)$$

Aşqar keçiriciliyi halı daha böyük marağ doğurur. Sadəlik üçün aşqarların tükəndiyi oblastı nəzərdən keçirərək, keçirici elektronlar sayının saxlanması şərtini

$$\sum_{\nu=1}^M n^{(\nu)}(\bar{u}) = n^{(\nu)}(0)M = n \quad (4.10.18)$$

kimi yazı bilərik. (4.10.16)-nı deformasiya tenzorunun kiçik qiymətləri üzrə sıraya ayıraraq, xətti hədlərlə kifayətlənərək, alırıq:

$$n^{(\nu)}(\bar{u}) = n^{(\nu)}(0) \left(1 - \frac{\delta F - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}}{k_0 T} + \dots \right) \quad (4.10.19)$$

(4.10.19)-u (4.10.18)-də nəzərə alaraq

$$n^{(\nu)}(0)M = n^{(\nu)}(0)M - \frac{n^{(\nu)}(0)}{k_0 T} \left[\sum_{\nu=1}^M \left(\delta F - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^{(\nu)} u_{\mathbf{k}} \right) \right] \quad (4.10.20)$$

Kvadrat mötərizədəki hədləri sıfıra bərabər edib, δF -in əvəzinə (4.10.17)-dəki ifadəsini nəzərə alaraq

$$M \delta F = \sum_{\nu=1}^M \sum_{\mathbf{k}=\nu}^{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^{(\nu)} u_{\mathbf{k}} = M \sum_{\mathbf{k}=\nu}^{\mathbf{k}} D_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \quad (4.10.21)$$

yaza bilərik. Buradan

$$D_{\mathbf{k}} = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^M \Delta_{\mathbf{k}}^{(\nu)} = \langle \Delta \rangle_{\mathbf{k}}, \quad (4.10.22)$$

alıraq, yəni Fermi səviyyəsinin sürüşməsinə təyin, keçirici elektronların sayının saxlanması təmin edən $D_{\mathbf{k}}$ tenzoru öz-özlüyündə $\Delta_{\mathbf{k}}^{(\nu)}$ tenzorunun minimumlar üzrə ortalaşmışdır. (4.10.22)-ni nəzərə alaraq $n^{(\nu)}(\bar{u})$ üçün ifadəni

$$n^{(\nu)}(\bar{u}) = n^{(\nu)}(0) \left[1 - \frac{\sum_{\mathbf{k}} \left(\langle \Delta \rangle_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}^{(\nu)} \right) \bar{\mu}_{\mathbf{k}}}{k_0 T} \right] = n^{(\nu)}(0) + \delta n^{(\nu)} \quad (4.10.23)$$

kimi yazıq. Deformasiya zamanı müxtəlif minimumlarda elektronların konsentrasiyası müxtəlif cür dəyişdiyindən, minimumlar daha ekvivalent olurlar. Tam keçiricilik üçün ifadə

$$\sigma(\bar{u}) = \sum_{\nu=1}^M \sigma^{(\nu)}(\bar{u}) = e \sum_{\nu=1}^M n^{(\nu)}(\bar{u}) \bar{\mu}^{(\nu)}, \quad (4.10.24)$$

kimi yazıq. Əgər minimumlarda enerji səviyyələri sferikdirsə, onda $\bar{\mu}^{(\nu)} = \mu$ vadinin nömrəsindən asılı olmur və bu halda (4.10.18)-ə əsasən $\bar{\sigma}(\bar{u}) = \sigma(0)$, yaxud bu yaxınlaşmada tenzomüqavimət olmur. Yox əgər $\bar{\mu}^{(\nu)}$ anizotropdursa, onda deformasiya yarandıqda keçiricilik də anizotrop olur:

$$\bar{\sigma}(\bar{u}) = \sigma(0) - e \sum_{v=1}^M \bar{\mu}^{(v)} \delta n^{(v)} \quad (4.10.25)$$

$\delta n^{(v)}$ -nin qiymətini müəyyən edən fiksə olunmuş deformasiya halında keçiriciliyin anizotropluğu yürüklüyün, yaxud tərs effektiv kütlənin anizotropluğu ilə əlaqədardır. Bu halı n -tip silisium misalında nəzərdən keçirək.

Əgər silisium kristalını [100] oxu boyunca sıxsaq, onda bu istiqamətdə atomlar arasındakı məsafə kiçilər, həmin istiqamət üzrə mübadilə inteqralı böyüyər, [010] və [001] istiqamətləri üzrə isə kiçilər. [100] istiqamətində keçirici zonanın dibi enir, perpendikulyar istiqamətlərdə qalxır.

$$\sum_{v=1}^M \delta n^{(v)} = 0 \quad (4.10.26)$$

olduğundan $(\pm k_x, 00)$ minimumlardakı dolu səviyyələr oblastı böyüyür, qalan hallarda isə kiçilir (şək. 4.22.). Elektronların birinci və dördüncü minimumlardakı konsentrasiyalarının artımını δn_1 ilə işarə edək, onda aydındır ki,

$$-4\delta n_2 = 2\delta n_1, \quad (4.10.27)$$

keçiricilik tenzorunun dəyişməsinə $\delta \bar{\sigma}$

$$\delta \sigma_{xx} = -e2\delta n_1 (\mu_{xx}^{(1)} - 2\mu_{xx}^{(2)}) = -e^2 \langle \tau \rangle 2\delta n_1 \left(\frac{1}{m_1} - \frac{2}{m_2} \right) \quad (4.10.28)$$

$$\delta \sigma_{yy} = -e^2 \langle \tau \rangle \left(\frac{2\delta n_1}{m_1} + \frac{2\delta n_2}{m_2} + \frac{2\delta n_3}{m_3} \right) = \quad (4.10.29)$$

$$= -e^2 \langle \tau \rangle \delta n_1 \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) = \delta \sigma_{xx}$$

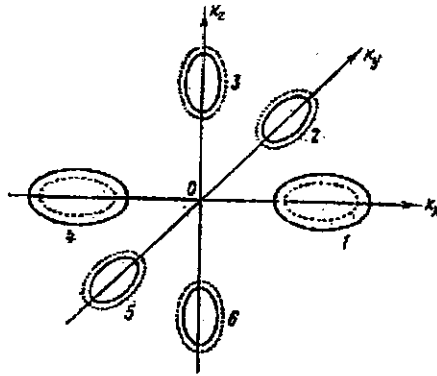
kimi ifadə etmək olar. Beləliklə, müxtəlif oxlar istiqamətində keçiriciliyin dəyişməsi həm qiymət, həm də işarəcə müxtəlifdir. Əgər təzyiği [110] istiqamətində tətbiq etsək, onda 1, 2, 4, 5 minimumları enər, 3 və 6 isə qalxarlar; $4\delta n_1 = -2\delta n_3$. Keçiriciliyin dəyişməsi

$$\delta \sigma_{xx} = -2e^2 \delta n_1 \langle \tau \rangle \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) = \delta \sigma_{yy} \quad (4.10.30)$$

$$\delta \sigma_{zz} = -4e^2 \langle \tau \rangle \delta n_1 \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) \quad (4.10.31)$$

Əgər kristalı [111] oxu boyunca sıxsaq, bütün ekstremumlar ekvivalent olaraq qalırlar, elektronların yenidən paylanması baş verməz və bu halda tenzomüqavimət müşahidə olunmamalıdır. Həqiqətən də tenzomüqavimət birinci bənddə haqqında danışılan yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsi nəticəsində meydana çıxma bilər.

İndi p - tip germanium və silisiumda tenzomüqavimətə baxaq. Onlarda tenzomüqavimətin böyük dəyişmələri müşahidə olunur və belə böyük dəyişmə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının yuxarıda göstərilən dəyişməsi baxımından izah oluna bilməz. Yada salaq ki, germanium və silisiumun valent zonası sferik çox yaxın enerji səthlərinə malikdirlər, ona görə tenzomüqavimətin belə anomal böyük qiymətə malik olmasını keçirici zonadakına oxşar olaraq keçiriciliyin anizotropluğu ilə izah etmək olmaz. Bunun izahı, valent zonasının cırılmasını – yüngül və ağır



Şəkil 4.22. Silisiumda deformasiya zamanı elektronların enerji minimumları arasında paylanması

deşiklərə uyğun iki enerji budağı $\vec{k} = 0$ nöqtəsində bir nöqtəyə yığılır, nəzərə alındıqda aydınlaşdı. Anizotrop deformasiya tətbiq edildikdə kristal qəfəsin sahə simmetriyası pozulur, bu da cırılmanın yox olmasına gətirib çıxarır - yüngül və ağırdeşiklərin valent zonasının tavanı müxtəlif kəmiyyətlər qədər əks istiqamətlərdə sürüşürlər. Enerji səviyyəsinin sürüşməsinin $\delta E(\vec{k})$ qiyməti \vec{k} dalğa vektorundan aşağıdakı kimi asılıdır:

$$\delta E(\vec{k}) = \pm \frac{bB}{2\bar{B}} \left(\frac{3}{k^2} \sum_y u_y k_y k_x - \sum_y u_y \right), \quad (4.10.32)$$

burada $\bar{B} = \left(B^2 + \frac{1}{5} C^2 \right)^{\frac{1}{2}}$; B, C - sabitlər, b - deformasiya potensialı

sabitidir. Yuxarıdakı işarə yüngül, aşağıdakı işarə isə ağırdeşiklərə aiddir. Yüngül və ağırdeşiklərin enerji zonalarının sürüşməsi keçirici zonadakıdeşiklərin ümumi sayını saxlamaqla $P_y + P_a = N_a$, onların konsentrasiyalarını dəyişdirir (aşqar keçiricilik halında tükənmə

oblastında). Amma yüngül və ağırdeşiklərin konsentrasiyalarının, onların yürüklüklerindəki fərq nəticəsində yenidən paylanması keçiricilik və müqaviməti dəyişir və $\delta p_i = -\delta p_o$ olduqda

$$\delta \sigma = e_p (\delta p_i \mu_{pi} + \delta p_o \mu_{po}) \quad (4.10.33)$$

olur, p_i -yüngül, p_o isə ağırdeşiklərin konsentrasiyasıdır.

Beləliklə, p -tip germanium və silisiumun anomal böyük tenzomüqaviməti ağır və yüngüldeşiklərin effektiv kütlələrinin və onların yürüklüklərinin müxtəlifliyi ilə əlaqədardır.

Əgər deformasiya olunmuş kristalı maqnit sahəsində yerləşdirsək, bütün qalvano- və termomaqnit hadisələr, deformasiya olunmamış kristallardakına nəzərən başqa cür cərəyan etməlidir. Analoji qaydada termoelektrik hadisələri də dəyişir. Bütün kinetik hadisələrin belə dəyişməsi kristalın deformasiyasının onun enerji quruluşunu dəyişməsi ilə əlaqədardır. **Deformasiya olunmuş yarımkəçiricilərdəki hadisələrin daha dəqiq təsvirində səpilmə mexanizminin, effektiv kütlə və digər kəmiyyətlərin dəyişmələrini nəzərə almaq lazımdır.**

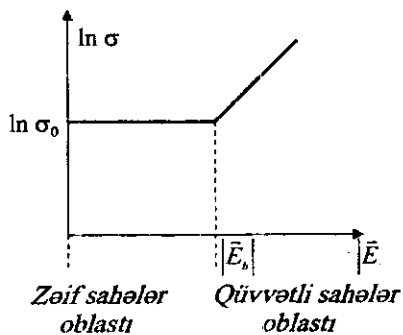
§ 4.11. Qüvvətli elektrik sahələrində yarımkəçiricilərdə daşınma hadisələri. Om qanunundan kənara çıxma

Bolsmanın kinetik tənliyini həll edərkən qəbul edilir ki, xarici elektrik və maqnit sahələri yükdaşıyıcıların enerji spektrində və relaksasiya müddətində nəzərə çarpacaq dərəcədə dəyişiklik yaratmır. Bu isə zəif elektrik və maqnit sahələrində doğrudur.

Xarici elektrik sahəsinin intensivliyinin müəyyən qiymətlərinə qədər yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və yürüklüyü elektrik sahəsinin intensivliyindən asılı olmur və elektrik sahəsinin təsiri ilə yarımkəçirici kristaldan cərəyan keçdikdə Om qanunu ödənilir:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (4.11.1)$$

Bu halda yarımkəçiricinin xüsusi keçiriciliyi $[\sigma = q_0(nu_n + pu_p)]$ xarici sahənin intensivliyindən asılı olmur. Yükdaşıyıcıların konsentrasiya və



Şəkil 4.23. Elektrik keçiriciliyinin elektrik sahəsinin intensivliyindən asılılığı

yürüklüyünü dəyişməyən belə elektrik sahələri **zəif elektrik sahələri** adlanır. Lakin elektrik sahəsinin artırmaqda davam etsək, sahə intensivliyinin müəyyən qiymətindən sonra Om qanunundan kənara çıxma müşahidə olunur. Om qanunundan kənara çıxmanın başlangıcına uyğun elektrik sahəsinin intensivliyinin minimum qiyməti **böhran qiyməti** (E_b) adlanır. Deməli, elektrik sahəsinin intensivliyinin böhran qiymətindən böyük qiymətlərində yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və yürüklükləri sahə intensivliyinin artması ilə hiss olunacaq dərəcədə artmağa başlayır (şək.4.23).

Sahə intensivliyinin böhran qiyməti yarımqeçiricilərin təbiətindən, temperaturdan və aşqarların konsentrasiyasından asılıdır.

Yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və ya yürüklüyü elektrik sahəsinin intensivliyindən asılı olan sahələr **qüvvətli elektrik sahələri** adlanır. Qeyd etdiyimiz kimi, sahənin böhran qiymətindən yuxarı qiymətlərində cərəyan sıxlığı ilə sahə intensivliyi arasındakı mütənasiblik pozulur ($\vec{j} \neq \sigma \vec{E}$), belə ki, σ -sabit qalmayıb, sahə intensivliyindən asılı olaraq dəyişməyə başlayır. Çox böyük sayda yarımqeçiricilər üçün $E_b \approx 10^5 \div 10^6$ V/m tərtibindədir, selen üçün isə $E_b \approx 10^3$ V/m-dir. Sahənin böhran qiyməti E_b yükdaşıyıcıların sahədə aldıkları v_d dreyf sürətinin, istilik hərəkətinin v_t sürətləri ilə eyni tərtibli olması şərtindən müəyyən olunur.

Temperaturun azalması ilə sahənin böhran qiyməti E_b də kiçilir, belə ki, E_b yükdaşıyıcıların yürüklüyündən asılıdır və temperatur kiçik olduqca, yürüklük u daha böyük olur.

Qeyri-bircins yarımqeçiricilərdə böhran sahəsi çox kiçik sahələrdə özünü büruzə verə bilər, belə ki, qeyri bircins yarımqeçiricilərdə müxtəlif təbəqələrin xüsusi müqavimətləri bir-birindən kəskin fərqlənə bildiyindən nümunəyə tətbiq olunmuş gərginliyin böyük hissəsi hər hansı yüksək müqavimətli çox kiçik qalınlıqlı təbəqədə düşə bilər və nəticədə sahənin bu hissədəki lokal intensivlik çox böyük qiymətə kimi kəskin artar. Yarımqeçiricilərdə yükdaşıyıcıların üstünlük təşkil edən səpilmə mexanizmindən asılı olaraq elektrik sahəsinin intensivliyinin böhran qiymətindən yuxarı qiymətlərə qədər artması ilə yürüklük $u \left(u = \frac{e\lambda}{m \cdot v} \right)$

arta və ya azala bilər. Yürüklük sahədən o andan başlayaraq asılı olur ki, \bar{v} sürəti sabitliyini itirir, daha doğrusu, \bar{v}_d - dreyf sürətinin \bar{v} sürətinə verdiyi əlavəni istilik hərəkətinin sürəti ilə müqayisədə nəzərə almamaq daha mümkün olmur. Belə ki, məsələn, atom kristallarında (Ga, Si) səpilmənin istilik mexanizmində $\lambda \bar{v}$ - sürətindən asılı olmur, \bar{v} isə

$(\bar{v} = \bar{v}_t + \bar{v}_d)$ \bar{E} - sahə intensivliyinin artması ilə artır ($v \sim \sqrt{E}$), yürlük isə azalır:

$$u \sim \frac{1}{E} = E^{-1/2} \quad (4.11.2)$$

İonlaşmış aşqarlardan səpilmə zamanı $\lambda \sim v^4, v \sim \sqrt{E}$, yürlük u \bar{E} - sahə intensivliyinin artması ilə artır:

$$u \sim (\sqrt{E})^3 = E^{3/2}. \quad (4.11.3)$$

Amma buna baxmayaraq yükdaşıyıcıların yürlüklüyünün dəyişməsi, təcrübələrin nəticələrindən görüldüyü kimi, çox cüzidir. Sadə intensivliyinin artması ilə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası hiss olunacaq dərəcədə artır.

Beləliklə, qüvvətli elektrik sahələrində Dreyf sürətinin dəyişən və həmçinin, yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını artıran hadisələr Om qanunundan kənara çıxmalara səbəb olur. Birinci qrup hadisələrə elektron-deşik qazının qızması və Qann effekti, ikinci qrup hadisələrə isə zərbə ilə ionlaşma, Ziner effekti və elektrostatik ionizasiya hadisələri aiddir. Əvvəlcə sərbəst qaçış yolunu və yükdaşıyıcıların yürlüklüyünün dəyişməsinə səbəb olan effektləri nəzərdən keçirək.

§ 4.12. Relaksasiya müddətinin elektrik sahəsindən asılı olması. Qızmar yükdaşıyıcılar

Xarici elektrik sahəsi təsir etdikdə kristalda yükdaşıyıcı iki ardıcıl toqquşma arasında müəyyən qədər enerji və kvazi-impuls (dreyf istiqamətində) əldə edir. Kristalın vahid həcmində elektron (və ya deşik) qazının vahid zamanda sahədən aldığı orta enerji $(\bar{j}\bar{E})$ -dir. Qərarlaşmış halda toqquşma nəticəsində vahid həcmdəki elektronların (deşiklərin) vahid zamanda verdiyi orta enerji də bu qiymətə bərabər olmalıdır. Əks halda qərarlaşmış hal yaranmazdı. Hər bir yükdaşıyıcının enerjisinin vahid zamanda dəyişməsi $\frac{dE}{dt} = \dot{E}$ -dirsə, onda vahid həcmdəki elektron qazının enerji dəyişməsinə tapmaq üçün bu kəmiyyətin enerjiyə görə orta qiymətini $\langle E \rangle$ götürməliyik, çünki \dot{E} -nin özü yükdaşıyıcının enerjisindən asılıdır. Beləliklə, qərarlaşmış hal üçün enerji balansını aşağıdakı kimi yazarıq:

$$(\bar{j}\bar{E}) = n\langle \dot{E} \rangle. \quad (4.12.1)$$

Aydındır ki, termodinamik tarazlıq halında bu bərabərliyin hər iki tərəfi sıfır olur və o, $0=0$ şəklində eyniliyə çevrilir. Elektrik sahəsinin E_x -dan kiçik qiymətlərində («zəif elektrik sahəsində») sol tərəf elektrik sahəsinin

intensivliyinə görə ikinci tərtibdən kiçik kəmiyyətdir: $(\bar{j}\bar{E}) \sim \bar{E}^3$ sağ tərəf də elastik səpilmə mexanizmlərini araşdırarkən aldığımız nəticələrdən məlum olduğu kimi, nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik kəmiyyətdir. Bu şəraitdə elektron qazının enerjiyə və kvazi-impulsa görə relaksasiya müddəti eynidir. Elektrik sahəsinin böhran qiymətindən sonra vəziyyət tamamilə başqa cür olur. Yükdaşıyıcıların sahədən aldığı enerji nəzərə çarpacaq dərəcədə artır, verdikləri enerji isə yalnız səpilmə ehtimalından asılıdır və səpilmə elastik olduğu üçün demək olar ki, dəyişməz qalır. Ona görə (4.12.1)-ün sol tərəfi sağ tərəfdən böyük olur və hər bir yükdaşıyıcıya düşən orta enerji $\langle E \rangle_e$ artmağa başlayır. Bu artım o vaxta qədər davam edir ki, əks istiqamətdə təsir göstərən hər hansı proses (məsələn, yükdaşıyıcılar tərəfindən fononların buraxılması) yükdaşıyıcının enerji artımının qarşısını alsın, onu tarazlaşdırsın.

Qərarlaşmış halda yükdaşıyıcıların orta kinetik enerjisi $\langle E \rangle_e = \frac{3}{2} k_e T$ -dir.

Digər tərəfdən, qərarlaşmış halda bu münasibət ödənilirsə, (4.12.1)-ün sağ tərəfi sıfıra bərabər olur. Ona görə balans tənliyini başqa cür də yazı bilərik:

$$(\bar{j}\bar{E}) = \frac{2}{3} \frac{\langle E \rangle_e - k_e T}{\tau_e} \cdot n, \quad (4.12.2)$$

burada τ_e - elektron (deşik) qazının enerjiyə görə götürülmüş orta relaksasiya müddətidir. Elektrik sahəsinin E_e -dən böyük qiymətlərində səpilmə prosesində qeyri-elastiklik nəzərə alınmayacaq dərəcədə az olduqda impulsa görə relaksasiya müddətindən (τ_e) kifayət qədər böyük ola bilər, yəni bu şəraitdə elektron qazının kristal qəfəsi ilə enerji mübadiləsi impuls mübadiləsinə nisbətən yavaş gedir. Bunun nəticəsində (4.12.2)-də $\frac{2}{3} \langle E \rangle_e - k_e T > 0$ olur. Bu isə o deməkdir ki, elektrik sahəsində

qərarlaşmış halda yükdaşıyıcıların orta kinetik enerjisi termodinamik tarazlıq halına nisbətən artmışdır. **Bu hadisə elektron (və yadeşik) qazının qızması adlanır.** Onu səciyyələndirmək üçün elektron (deşik) qazının temperaturu (T_e) anlayışından istifadə edilir. Orta kinetik enerji ilə temperatur arasındakı əlaqədən istifadə etsək, yazı bilərik:

$$\langle E \rangle_e = \frac{3}{2} k_e T_e. \quad (4.12.3)$$

İndi artıq elektron və yadeşik qazının qızması əyani mənə kəsb etmiş oldu. Yükdaşıyıcılar xarici sahədən aldığı əlavə enerjini kristal qəfəsinə tamamilə verməyə macal tapmır və onların temperaturu (T_e) böyüyərək, kristal qəfəsinin temperaturundan (T) artıq olur. Belə

yükdaşıyıcılar **qızmar yükdaşıyıcılar** adlanır. Aydınır ki, yükdaşıyıcıların temperaturunu (4.12.3) münasibəti ilə seçdikdə **hesablama sistemini yükdaşıyıcılar sistemi ilə bağlamış olduq**. Əks halda ümumi orta kinetik enerjiyə dreyflə bağlı olan nizamlı (irəliləmə) hərəkətin kinetik enerjisi də (E_d) daxil olardı. Temperatur isə xaoitik hərəkətin orta kinetik enerjisi ilə təsvir olunur. Dreyfi nəzərə aldıqda yükdaşıyıcıların orta enerjisi:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} k_b T_c + E_d. \quad (4.12.3, a)$$

Lakin onu da qeyd edək ki, biz yükdaşıyıcıların temperaturu mövhumundan istifadə etdikdə müəyyən qədər xəyata yol vermiş oluruq. Çünki əslində temperatur termodinamik tarazlıqda olan sistem üçün birqiymətli mənə kəsb edir. Bizim baxdığımız halda isə termodinamik tarazlıq pozulmuşdur. **Sistem bir-biri ilə təmasda olan iki hissədən: a) istilik verən elektron qazından və b) istilik alan kristal qəfəsdən ibarətdir.** Yükdaşıyıcıların qızmar halda olması məhz tarazlıq halının pozulması deməkdir. Ona görə də burada işlətdiyimiz T_c temperaturu adi bildiyimiz temperaturun bütün termodinamik xassələrinə malik olmaya da bilər, **həm də T_c xarici elektrik sahəsinin intensivliyindən, enerji və impulsun səpilmə mexanizmlərindən asılıdır.**

Yükdaşıyıcıların temperaturu əyani mənə kəsb etməklə bərabər, həm də göstərir ki, elektron və deşiklər qızmar hala keçdikdə bütün kinetik əmsallar xarici elektrik sahəsinin intensivliyindən asılı olacaq. Bununla yanaşı, yadda saxlamaq lazımdır ki, yükdaşıyıcıların temperaturunu (4.12.3) şəklində təyin etmək yeganə yol deyil, onu, məsələn, Eynşteyn münasibəti adlanan düsturla da seçə bilərik:

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_b T_c'}{e}, \quad (4.12.3, b)$$

burada D -yükdaşıyıcıların diffuziya əmsalı, e -onların yükü, μ -dreyf yürlüklüyüdür (əvvəlkindən fərqləndirmək üçün T_c -nin üzərində ştrix yazdıq). Məsələ burasındadır ki, temperaturun təyin olunmasında (4.12.3) və ya (4.12.3,b) münasibətlərinin heç birinin nə üstünlüyü və nə də çatışmazlığı vardır. Özü də T_c və T_c' -in qiymətləri ümumiyyətlə bir-birinin üzərinə düşmür. Eləcə də yükdaşıyıcıların temperaturunu başqa cür də seçmək olar. Belə ixtiyarilik sistemdə termodinamik tarazlığın olmaması ilə əlaqədardır.

Beləliklə, yükdaşıyıcıların qızmar hala keçməsi relaksasiya müddətinin və deməli, yürlüklüyün və elektrik keçiriciliyinin xarici elektrik sahəsinin intensivliyindən asılı olaraq dəyişməsinə və texniki tətbiq baxımından maraqlı olan bir sıra yeni effektin müşahidə edilməsinə

səbəb olur. Məsələn, termoelektrik emissiyası hadisəsində elektronları qoparmaq üçün adətən onu yüksək temperaturlardək qızdırmaq tələb olunur. Qızmar elektronlu yarımkəçiricidə isə elektronların orta enerjisi kristal qəfəsinin orta enerjisindən böyük olduğuna görə onların emissiyası üçün kristalın özünü qızdırmaq və deməli faydasız enerji sərf etmək lazım gəlir.

Elektrik sahəsinin böyük qiymətlərində baş verən bəzi hadisələrlə bir qədər sonra tanış olacağıq. İndi isə qüvvətli həyəcanlanma şərti üçün paylanma funksiyasını tədqiq edək.

§ 4.13. Kəskin qeyri-tarazlıq halının paylanma funksiyası

Yükdaşıyıcıların paylanma funksiyasını termodinamik tarazlıq şəraitində (III fəsil) və tarazlıqdan kənara çıxma kiçik olduqda (V fəsil) müfəssəl tədqiq etmişik. Burada isə tarazlığın kəskin surətdə pozulduğu (tarazlıqdan kənara çıxma böyük olduğu) hal üçün paylanma funksiyasını araşdıracağıq. Asanlıqla göstərmək olar ki, elektrik sahəsi zəif olduqda (tarazlıqdan kənara çıxma kiçik olduqda: $f = f_0 + f^0$) yükdaşıyıcıların orta kinetik enerjisi termodinamik tarazlıq halındakına ($\langle E_0 \rangle$) bərabərdir. Doğrudan da:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{2}{nh^3} \int_{(v_x)} E(\vec{p}) f(\vec{p}) d\tau_{\vec{p}} = \frac{2}{nh^3} \int_{(v_x)} E(\vec{p}) f_0(\vec{p}) d\tau_{\vec{p}} + \\ &+ \frac{2}{nh^3} \int_{(v_x)} E(\vec{p}) f^0(\vec{p}) d\tau_{\vec{p}} = \langle E_0 \rangle, \end{aligned} \quad (4.13.1)$$

burada f^0 iştirak edən inteqral sıfırdır. Çünki, $f^0(\vec{p})$ kvazi-impulsun tək funksiyasıdır (tək funksiyanın simmetrik sərhədlərə görə inteqralı sıfıra bərabərdir).

Elektron qazının qızmasını nəzərə aldıqda isə belə olmur. Bu halda paylanma funksiyasını aşağıdakı kimi iki həddin cəmi şəklində göstərmək daha əlverişlidir:

$$f(\vec{p}) = \frac{f(\vec{p}) + f(-\vec{p})}{2} + \frac{f(\vec{p}) - f(-\vec{p})}{2} \quad (4.13.2)$$

və ya

$$f(\vec{p}, \vec{E}) = f_s + f_a. \quad (4.13.3)$$

Burada paylanma funksiyasının elektrik sahəsinin intensivliyindən asılılığını da göstərdik və onun f_s -simmetrik və f_a -antisimmetrik hissələrini aşağıdakı kimi əvəz etdik:

$$f_s = \frac{f(\vec{p}) + f(-\vec{p})}{2}, \quad (4.13.4)$$

$$f_a = \frac{f(\vec{p}) - f(-\vec{p})}{2}, \quad (4.13.5)$$

asanlıqla yoxlamaq olar ki, $f_a(-\vec{p}) = f_a(\vec{p})$ və $f_s(-\vec{p}) = -f_s(\vec{p})$. Elektron qazının qızması müşahidə olunmayan sahələrdə f_a -tarazlıq paylanma funksiyası ilə üst-üstə düşür ($f_a = f_0$), f_s isə onun üzərinə gələn kiçik əlavəyə çevrilir ($f_s = f^{(1)}$). Artıq hər hansı kəmiyyətin orta qiymətini hesablayarkən (4.13.3) paylanma funksiyasından istifadə etmək lazımdır. Özü də paylanma funksiyasını bu cür iki hissəyə ayırmağın aydın fiziki mənası vardır. Antisimmetrik hissə sahənin təsiri ilə yaranan hər hansı seli (cərəyan, enerji seli), simmetrik hissə isə yükdaşıyıcıların enerjiyə görə paylanmasını təsvir edir. Doğrudan da, əgər enerjinin orta qiymətini (4.13.3) yazılışından istifadə edib hesablasaq, yekun ifadədə yalnız f_a toplanan iştirak edəcək:

$$\langle E \rangle = \frac{2}{nh^3} \int_{(v_a)} E(\vec{p}) f(\vec{p}, \vec{E}) d\tau_{\vec{p}} = \frac{2}{nh^3} \int_{(v_a)} E(\vec{p}) f_s(\vec{p}, \vec{E}) d\tau_{\vec{p}}, \quad (4.13.6)$$

burada f_a iştirak edən hədd, inteqralaltı funksiya \vec{p} -yə görə tək funksiya olduğu üçün sıfır bərabər oldu. Eyni qayda ilə cərəyan sıxlığı və ya enerji seli sıxlığını hesablasaq, əksinə, f_s iştirak edən hədd sıfır olacaq, f_a iştirak edən hədd isə sıfırdan fərqli olacaq. İndi aydındır ki, bu halda əsas məsələ kinetik tənliyin həllindən paylanma funksiyasının simmetrik və antisimmetrik hissələrini tapmaqdır. f -in (4.13.3) ifadəsini kinetik tənlikdə yerinə yazıb və onu f_a, f_s iştirak edən hədlərə görə qruplaşdırsaq, görürük ki, kinetik tənlik f_a və f_s -ə görə iki tənlikdən ibarət sistem tənliyə çevrilir. Toqquşma inteqralının f_a və f_s iştirak edən hissələrini uyğun olaraq I_a və I_s ilə işarə edib, tək funksiyanın öz arqumentinə görə birinci tərtib törəməsini cüt və cüt funksiyanın törəməsinin tək funksiya olduğunu nəzərə alsaq, maqnit sahəsi təsir etmədikdə ($\vec{B} = 0, \vec{F} = -e\vec{E}$) kinetik tənliyin əvəzinə alarıq:

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + (\vec{v}, \nabla f_a) + (\vec{F}, \nabla_{\vec{p}} f_a) = I_a, \quad (4.13.7)$$

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + (\vec{v}, \nabla f_s) + (\vec{F}, \nabla_{\vec{p}} f_s) = I_s. \quad (4.13.8)$$

Bu tənliklər sistemini həll etmək çox böyük çətinliklər tələb edir. Yalnız müasir hesablayıcı maşınların tətbiqi ilə onları ədədi hesablama yolu ilə həll etmək mümkündür. Ona görə də çox vaxt enerjinin və kvazi-impulsun saxlanması qanunundan istifadə etmək daha məqsəduyğun olur. Bu münasibətlər elektron və ya deşik qazı fəzada bircins paylanmış olduqda qərarlaşmış hal üçün çox sadə şəkil alır. Doğrudan da belə olduqda yükdaşıyıcıların tam enerjisi və tam kvazi-impulsu zamandan asılı

olmur və hər hansı kəmiyyətin qradiyentinin yaratdığı sel də sıfıra bərabər olur. Bu zaman cərəyan sıxlığı vektoru:

$$\vec{j} = en\vec{v}_d, \quad (4.13.9)$$

burada \vec{v}_d - dreyf sürətidir. Onda enerji balansının (4.12.1) ifadəsində yerinə yazsaq:

$$e(\vec{v}_d \vec{E}) = \frac{2}{3} \frac{(E) - k_0 T}{\tau_E}. \quad (4.13.10)$$

Digər tərəfdən, dreyf sürətinin $\vec{v}_d = \mu \vec{E}$ düsturunda μ -nü impuls üzrə relaksasiya müddəti vasitəsi ilə ifadə etsək, alarıq:

$$\vec{v}_d = \frac{e}{m^*} \tau_p \vec{E}, \quad (4.13.11)$$

burada m^* - hal sıxlığına görə hesablanmış effektiv kütlədir. τ_p -impulsa görə relaksasiya müddətini elektron və deşik qazı qızdıqda (4.13.7) və (4.13.8) tənliklərinin həllindən tapmaq lazımdır. (4.13.10) və (4.13.11)-yə enerji və kvazi-impuls üçün balans tənliyi deyirlər. τ_E və τ_p yükdaşıyıcılar sistemi ilə kristal qəfəsi arasında baş verən enerji və kvazi-impuls mübadiləsini səciyyələndirir.

§ 4.14. Qızmar yükdaşıyıcıların temperaturu

Zonalar nəzəriyyəsini şərh edərkən göstərdik ki, yükdaşıyıcıların öz aralarındakı qarşılıqlı təsiri özü ilə uzlaşan potensiolla əvəz etmək olar. Ona görə də termodinamik tarazlıq halında yükdaşıyıcıların hamısına birlikdə ideal qaz kimi baxa bilirdik. Zəif elektrik sahəsində də elektron və deşiklərin özlərindən səpilməsini nəzərə almadıq. Lakin qüvvətli elektrik sahəsində elektron (və ya deşik) qazının qızması baş verdikdə onların öz aralarındakı qarşılıqlı təsiri nəzərə almamaq olmaz. Eyni növ yükdaşıyıcılara baxsaq, onların effektiv kütlələri eyni olduğu üçün birbirindən səpilərkən enerji və impuls mübadiləsi kristal qəfəsinin qüsurlarından səpilmə mexanizmlərinə nisbətən daha sürətlə baş verir, həm də impulsa və enerjiyə görə relaksasiya müddəti eyni olur. Elektronun elektrondan (və ya deşikdən) səpilməsinə uyğun gələn relaksasiya müddətini τ_e ilə işarə edək. Səpilmə mexanizmlərinin roluna görə yükdaşıyıcıların qızmar hala keçməsi aşağıdakı üç müxtəlif halla təsvir oluna bilər:

$$1) \tau_e \ll \tau_p \ll \tau_E. \quad (4.14.1)$$

(4.14.1) şərti ödənildikdə yükdaşıyıcıların kristal qəfəsinin qüsurlarından (o cümlədən fononlardan) səpilməsi zamanı baş verən impuls və enerji

mübadiləsi yükdaşıyıcıların bir-birindən səpilməsinə nisbətən çox yavaş gedir. Başqa sözlə, səpilmədə digər mexanizmlər müəyyən rol oynaya biləcəyi vaxta qədər yükdaşıyıcılar öz aralarında külli miqdarda toqquşmaya uğrayaraq enerji və impulsun statistik paylanmasını təmin etmiş olur. Onda elektron qazına kristal qəfəsi ilə çox zəif qarşılıqlı təsirdə olan bir termodinamik sistem kimi baxa bilərik. Bu sistemdə ayrı-ayrı zərrəciklərin bir-biri ilə toqquşması nəticəsində enerjiyə və impulsa görə tarazlıq bərpa olunur. Deməli, həm temperatur birqiymətli mənə kəsb edir, həm də yükdaşıyıcılar sistemi bütövlükdə \bar{v}_d sürəti ilə dreyf edir. Yükdaşıyıcılar sisteminin T_c temperaturu kristal qəfəsinin T temperaturundan fərqli olur. Bu mənzərəni mayenin (və ya qazın) boruda axmasına bənzətmək olar. Maye rolunu yükdaşıyıcılar sistemi, boru rolunu isə kristal qəfəsi oynayır. Ona görə bu hal hidrodinamik yaxınlaşma adlanır. Tarazlıq halında $f(\vec{p})$ paylanma funksiyası toqquşma inteqralının sıfıra bərabər olmasını təmin etməlidir. f indi \bar{v}_d və T_c -dən asılı olduğu üçün $\bar{v}_d = 0$ olduqda bu, o deməkdir ki, paylanma funksiyası ehtə Fermi-Dirak paylanma funksiyası şəklindədir. Ancaq temperaturu T_c ilə əvəz etmək lazımdır. Aydın ki, $\bar{v}_d \neq 0$ olduqda hesablama sistemini ehtə seçə bilərik ki, həmin sistemdə yenə də $\bar{v}_d = 0$ olsun. Onda bu sistemdə də yuxarıda apardığımız mülahizələr doğru olacaq. Kristal qəfəsi ilə bağlanmış sistemə keçsək, Fermi-Dirak paylanma funksiyasında elektronun \bar{v} sürətini $\bar{v} - \bar{v}_d$ ilə əvəz etməliyik. Onda paylanma funksiyası:

$$f(\vec{p}) = \frac{1}{e^{\frac{E(\vec{p}) - E(\vec{p}_d) - F}{k_0 T_c}} + 1} \quad (4.14.2)$$

və cırlaşma olmadıqda:

$$f(\vec{p}) = e^{\frac{F - E(\vec{p} - \vec{p}_d)}{k_0 T_c}} \quad (4.14.3)$$

Axırıncı ifadə dreyfli Maksvel paylanması adlanır. Əgər dreyf sürəti xarakteristik istilik sürətindən ($\frac{m^* v_d^2}{2} = \frac{3}{2} k_0 T_c$ - münasibəti ilə təyin olunan sürətdən) çox-çox kiçik olarsa ($v_d \ll v_T$), onda (4.14.3)-ni v_d -nin üstlərinə görə sıraya ayıraraq birinci iki həddə kifayətlənə bilərik:

$$f(\vec{p}) = e^{\frac{F - E(\vec{p})}{k_0 T_c}} + \frac{1}{k_0 T_c} (\vec{v}_d \nabla_{\vec{v}_d} E) e^{\frac{F - E(\vec{p})}{k_0 T_c}} = f_s + f_a \quad (4.14.4)$$

Burada:

$$f_s = e^{\frac{F - E(\vec{p})}{k_0 T_c}} \quad (4.14.5)$$

$$f_a = \frac{(\bar{v}_d \nabla_{v_d} E)^{F-E(\bar{v})}}{k_0 T_e} e^{-\frac{F-E(\bar{v})}{kT_e}} \quad (4.14.6)$$

Qərarlaşmış hal üçün \bar{v}_d və T_e -ni (4.13.11) və (4.13.10) balans tənliklərindən təyin edə bilərik. Onları aşağıdakı kimi yazmaq:

$$e\bar{E} = \frac{m\bar{v}_d}{\tau_p} \quad (4.14.7)$$

$$e(\bar{v}_d \bar{E}) = \frac{k_0(T_e - T)}{\tau_f} \quad (4.14.8)$$

τ_p, τ_e - impulsa və enerjiyə görə relaksasiya müddətinin orta qiymətləri \bar{v}_d və T_e -dən asılıdır. Paylanma funksiyası (4.14.4) artıq məlum olduğu üçün müxtəlif səpilmə mexanizmlərində \bar{v}_d və T_e -ni hesablamaq mümkündür. Bu qiymətlərdən (4.14.7) və (4.14.8)-də istifadə etməklə τ_p və τ_e -ni tapmaq olar.

$$2) \tau_p \leq \tau_e \ll \tau_e \quad (4.14.9)$$

Bu şərt ödənildikdə impuls mübadiləsi həm kristal qəfəsi ilə və həm də yükdaşıyıcıların öz aralarında gedir, lakin birinci üstünlük təşkil edir, enerji mübadiləsi isə yalnız yükdaşıyıcıların öz aralarında baş verir (çünki $\tau_p \ll \tau_e$ -dir). Yəni enerji mübadiləsi baxımından yükdaşıyıcıların hamısına birlikdə sərbəst termodinamik sistem kimi baxmaq olar və elektronların (və ya dəşiklərin) temperaturu birqiymətli mənə kəsb etmiş olur. Yükdaşıyıcılar sisteminin sükunətdə olduğu sistemdə paylanma funksiyasının simmetrik hissəsi yenə də (4.14.5) şəklində olur. Lakin f_a -ni əvvəlki şəkildə götürə bilmərik. Çünki (kvazi) impuls mübadiləsi əsasən kristal qəfəsi (daha doğrusu, onun qüsurları) ilə gedir və bu cəhətdən yükdaşıyıcılar sərbəst sistem kimi götürülə bilməz. Bu halda paylanma funksiyasının antisimmetrik hissəsini (8.13.8) kinetik tənliyin həllindən tapmaq lazımdır. I_a toqquşma integralını hesablayarkən (I_a - impulsun səpilmə sürətini xarakterizə edir) yükdaşıyıcılardan səpilməni nəzərə almamaq olar. Özü də əksər halda (optik fononlardan səpilmə istisna olmaqla) səpilməni elastik qəbul etmək mümkündür. Məsələn, qərarlaşmış hal üçün izotrop dispersiya ödənildikdə toqquşma integralını aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$I_a = -\frac{f_a}{\tau_p(E)} \quad (4.14.10)$$

Bunu (8.13.8)-də yerinə yazıb, f_a -ni tapmaq:

$$f_a(\bar{p}, \bar{E}) = -\tau_p(E) [(\bar{v}, \nabla f_a) - e(\bar{E}, \nabla_p f_a)] \quad (4.14.11)$$

f_a -in (4.14.5) ifadəsindən istifadə edib, buradan f_a -ni asanlıqla

hesablaya bilərik. Qeyd edək ki, **paylanma funksiyasının simmetrik və antisimmetrik hissələrinin (4.14.5) və (4.14.11) şəklində götürülməsi kvazi-hidrodinamik yaxınlaşma adlanır.**

Artıq paylanma funksiyası məlum olduğu üçün sistemin halını təsvir edə bilərik. Məsələn, sistem bircins ($\nabla f_s = 0$) olduqda f_s -nin (4.14.11) ifadəsindən istifadə edib, cərəyan sıxlığını hesablaya bilərik. Asanlıqla göstərə bilərik ki, bu halda:

$$\vec{j} = en\mu\vec{E}. \quad (4.14.12)$$

Ancaq indi μ həm kristalın (T) və həm də yükdaşıyıcıların (T_s) temperaturdan asılıdır: $\mu(T_s, T)$. Yükdaşıyıcıların temperaturunu balans tənliyindən tapa bilərik. Bunun üçün \vec{v}_s -nin yerinə $\mu(T_s, T)\vec{E}$ yazaq:

$$e\mu(T_s, T)|\vec{E}|^2 = \frac{k_0(T_s - T)}{\tau_s}, \quad (4.14.13)$$

τ_s - məlum səpilmə mexanizminə görə, μ isə təcrübədən (tətbiq olunan elektrik sahəsində) hesablanır.

Aydınır ki, sərbəst yükdaşıyıcılar bir neçə növ olduqda (elektron, deşik, «yüngül» deşik, «ağır» deşik və s.) hər növ yükdaşıyıcı üçün relaksasiya müddətini ayrıca götürmək lazımdır və yenə də enerji və impuls mübadiləsinin fərqli olması nəzərə alınmalıdır. Yükdaşıyıcılar bir neçə növ olduqda araşdırılması lazım gələn halların sayı da kəskin artır. Misal olaraq iki hala baxaq: 1) Tutaq ki, kristalda iki müxtəlif növ (elektron, deşik) sərbəst yükdaşıyıcılar mövcuddur və onların effektiv kütlələri eyni tərtibdədir. Onda bu cür müxtəlif növ zərrəciklər arasında həm impuls, həm də enerji mübadiləsi çox sürətlə gedə bilər və onlar üçün eyni ümumi temperatur götürmək olar. Bu temperatur ümumiyyətlə kristal qəfəsinin temperaturundan fərqlidir. 2) Əgər elektron və deşiyin effektiv kütlələri bir-birindən kəskin fərqlidirsə, onda elektron və deşik üçün temperaturu ayrı-ayrılıqda götürmək lazımdır. Bu temperaturlar bir-birindən və kristal qəfəsinin temperaturundan fərqlidir.

Hər iki halda yüklərinin işarəsi müxtəlif, kütlələri m_e^* və m_h^* olan iki yüklü zərrəcik məsələsinə baxmaq lazım gəlir. Belə zərrəciklərin bir-biri ilə qarşılıqlı təsirinə uyğun gələn potensial enerji artıq bizə məlum olan aşağıdakı ifadə ilə təsvir olunur:

$$E_{pot} = -\frac{e^2}{\epsilon r} e^{-\sigma}, \quad (4.14.14)$$

burada $\frac{1}{q}$ - ekranlama radiusudur. Mott-Vanye eksitonuna baxarkən (III fəsil) gördük ki, bu məsələnin həlli elektron-deşik sisteminin ətalət mərkəzinin irəliləmə hərəkətinə və gətirilmiş kütləyə:

$$m_{np}^* = \frac{m_n^* m_p^*}{m_n^* + m_p^*} \quad (4.14.15)$$

bərabər bir kütlə ilə zərrəciklərdən birinin digəri ətrafında \bar{r} radius vektoru ilə xarakterizə olunan fırlanma hərəkətinə gətirib çıxarır. Elektron – deşik cütünün bir-birinə görə nisbi hərəkətinin (4.14.14) potensial enerjisinin, yükdaşıyıcı ilə ion mərkəzinin qarşılıqlı təsir enerjisi arasındakı oxşarlıqdan istifadə etsək, hər iki səpilmədə relaksasiya müddətinin eyni cür ifadə olunacağını görürük. Ancaq elektron – deşik cütü üçün effektiv kütlə əvəzinə getirilmiş kütlə, kristalın T temperaturu əvəzinə qızmar hala keçmiş yükdaşıyıcıların T_s temperaturunu, N_i əvəzinə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını (n) götürməliyik:

$$\tau_s = c_1 \frac{\varepsilon^2 m_{np}^{*2}}{n e^4} (k_0 T_s)^2 \cdot \frac{1}{\left[\ln(1 + \beta) - \frac{\beta}{1 + \beta} \right]}, \quad (4.14.16)$$

$$\beta = \frac{8E}{\hbar^2 q^2} = \frac{12k_0 T_s}{\hbar^2 q^2}.$$

Bu düsturu çıxararkən $E = \frac{3}{2} k_0 T_s$ yazdıq və sabit ədədlərin hasilini c_1 vuruğu ilə işarə etdik. Göründüyü kimi, yükdaşıyıcıların bir-birindən səpilməsinə uyğun gələn relaksasiya müddəti onların konsentrasiyası ilə tərs mütənəsbdir. Deməli, τ_s -nin kifayət qədər kiçik olması, yeni (4.14.1) və (4.14.9) şərtlərinin ödənilməsi üçün yükdaşıyıcıların konsentrasiyası müəyyən minimum qiymətdən böyük olmalıdır. Bunu aydınlaşdırmaq məqsədi ilə $\tau_s = \tau_e$ və $\tau_s = \tau_p$ şərtlərinə (enerjinin və impulsun relaksasiyasında yükdaşıyıcılarla kristal qəfəsinin qüsurlarının bərabər rol oynadığı şəraitə) uyğun gələn n_e və n_p konsentrasiyaların tərtibini qiymətləndirək. Bu əməliyyatı böyük dəqiqliklə aparmaq üçün τ_s və τ_p -ni (4.13.7) və (4.13.8)-dən təyin etməliyik. Riyazi çətinlikləri nəzərə alıb, həmin əməliyyatın əvəzinə impulsa görə sərbəst yolun uzunluğundan və balans tənliyindən istifadə edək. Temperaturu T_s olan yükdaşıyıcılar sistemində orta sürət v_s olduğu üçün impulsa görə sərbəst yolun uzunluğu:

$$l_p = v_s \tau_p. \quad (4.14.17)$$

Hidrodinamik yaxınlaşmada (4.14.7) və (4.14.8)-də (4.14.17)-ü nəzərə alsaq, τ_s üçün alarıq:

$$\tau_s = \frac{k_0 (T_s - T)}{e^2 \bar{E}^2 l_p} m_{np}^* v_s. \quad (4.14.18)$$

$v_{T_e} = \left(\frac{3k_0 T_e}{m_{np}^*} \right)^{\frac{1}{2}}$ olduğunu nəzərə alıb, $(T_e - T) \approx T_e$ olduqda (aşağı temperaturlarda $T \ll T_e$ şərti asanlıqla ödənilir) $\tau_e = \tau_E$ halı üçün (4.14.16) və (4.14.18)-in sol tərəflərinin bərabərliyindən alırıq:

$$n_E = c'_1 \frac{e^2 |\bar{E}|^2 l_p}{e^2 \left[\ln(1 + \beta) - \frac{\beta}{1 + \beta} \right]} \quad (4.14.19)$$

Burada c'_1 sabit vuruqdur. n_p -ni tapmaq üçün τ_p -ni (4.14.17)-dən tapıb, (4.14.16) ilə bərabərləşdirmək lazımdır:

$$n_p = c''_1 \frac{(\varepsilon k_0 T_e)^2}{l_p e^4 \left[\ln(1 + \beta) - \frac{\beta}{1 + \beta} \right]} \quad (4.14.20)$$

Yenə də sabit ədədlərin hasilini c'_1 -lə işarə etdik. n_E və n_p -nin nisbətini tapsaq, görürük ki, o, uyğun relaksasiya müddətlərinin tərs nisbəti tərtibindədir. Doğrudan da:

$$\frac{n_E}{n_p} = \frac{c'_1}{c''_1} \frac{e^2 |\bar{E}|^2 l_p^2}{(k_0 T_e)^2} \quad (4.14.21)$$

(4.14.17) və (4.14.18)-dən isə:

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{e^2 l_p^2 |\bar{E}|^2}{m_{np}^* k_0 T_e \cdot v_{T_e}^2} = \frac{e^2 l_p^2 |\bar{E}|^2}{3(k_0 T_e)^2} \quad (4.14.22)$$

Axıncı iki ifadənin müqayisəsindən alırıq:

$$\frac{n_E}{n_p} \approx \frac{\tau_p}{\tau_E} \quad (4.14.23)$$

Səpilmə elastik (və ya elastikliyə çox yaxın) olduğu üçün sağ tərəf vahiddən kiçikdir. Əks halda yükdaşıyıcılar qızmar hala keçə bilməz. Onda $n_E < n_p$ olmalıdır. Deməli, yükdaşıyıcılar sistemində həm impuls və həm də enerji mübadiləsinin üstünlük təşkil etməsi üçün onların konsentrasiyası yalnız enerji mübadiləsi üstünlük təşkil edən hala nisbətən daha böyük olmalıdır. Yeni yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının qiyməti baxımından kvazi-hidrokinamik yaxınlaşma ödənilən şərait hidrodinamik yaxınlaşmaya nisbətən daha asanlıqla yaranır. Bununla belə, hər iki növ yükdaşıyıcının güclü injeksiyası baş verən halda, yaxud qadağan olunmuş zonasının eni çox kiçik olan məxsusi yarımkeçiricilərdə hidrodinamik yaxınlaşma asanlıqla ödənilə bilər.

$$3) \tau_p \leq \tau_E \ll \tau_e \quad (4.14.24)$$

Bu bərabərsizliklərin ödənilməyi şəraitdə artıq yükdaşıyıcılara sərbəst sistem kimi baxmaq olmaz. Burada əsas rolu yükdaşıyıcıların kristalın qüsurlarından səpilməsi oynayır. Paylanma funksiyasının simmetrik və antisimmetrik hissəsini (4.13.7) və (4.13.8) tənliklərinin həllindən tapmaq lazımdır. Lakin bununla belə, paylanma funksiyası bütün hallar üçün eyni olmayıb, tətbiq olunan nümunədən və təcrübi şəraitdən asılı olur. Xüsusilə də səpilmədə qeyri-elasticlik əsas rol oynayır. Qeyri-elasticlik əmsalını η ilə işarə etsək, onu belə təyin edə bilərik:

$$\eta = \frac{\tau_p}{\tau_E}. \quad (4.14.25)$$

Qeyri-elasticlik zəif olduqda $\eta \ll 1$ güclü olduqda isə $\eta \approx 1$ -dir. (4.13.11)-ni \bar{v}_d -yə skalyar vurub, (4.13.10), (4.12.3) və (4.14.25)-ni nəzərə alsaq:

$$k_0 T_e + \frac{2}{3} E_d - k_3 T = \frac{m^* v_d^2}{\eta} \quad (4.14.26)$$

olduğunu asanlıqla müəyyən edirik. $\eta \ll 1$ -dirsə, (4.14.26)-dan

$$m^* v_d^2 \ll k_0 (T_e - T) + \frac{2}{3} E_d. \quad (4.14.26, a)$$

İzoenergetik səthlər küre şəklində olduqda: $E_d = \frac{m^* v_d^2}{2}$ onda:

$$\frac{2}{3} m^* v_d^2 \ll k_0 (T_e - T). \quad (4.14.27)$$

Burada T -ni atsaq bərabərsizlik daha da güclənər, həm də nəzərə alsaq ki, $\frac{3}{2} k_0 T_e = \frac{1}{2} m^* v_r^2$, onda (4.14.27)-dən:

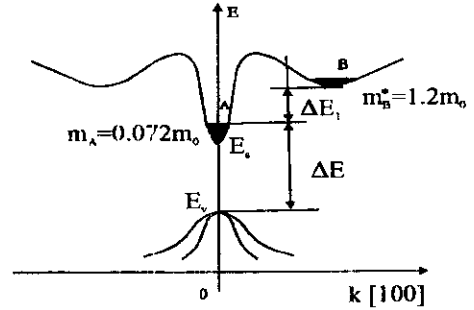
$$\frac{2}{3} m^* v_d^2 \ll 3 m^* v_r^2 \quad \text{və ya } v_d \ll v_r. \quad (4.14.28)$$

Bu, onu göstərir ki, baxdığımız halda paylanma funksiyasının antisimmetrik hissəsi çox az rol oynayır və hadisələr zəif elektrik sahəsində olduğu kimi baş verir. (4.14.26.a) və (4.14.28) şərtlərinin ödənilməyi hala diffuziya yaxınlaşması deyilir. Bunun mənası ondan ibarətdir ki, yükdaşıyıcıların sahədən aldığı enerji bütün sərbəstlik dərəcələri üzrə demək olar ki, eyni paylanır. Paylanma funksiyası simmetrikləyə çox yaxındır, yükdaşıyıcılar sistemi isə bütövlükdə sahənin təsiri istiqamətdə çox kiçik sürətlə dreyf edir. Debay temperaturundan aşağı temperaturalarda optik fononlardan səpilmə müstəsna olmaqla (səpilmənin qeyri-elastic olması üzündən), impulsun bütün araşdırdığımız mexanizmlər üzrə səpilməsində bu şərait həyata keçir.

Əgər impulsun optik fononlardan səpilməsi Debay temperaturundan aşağı temperaturalarda baş verirsə, yəni $k_0 T \ll \hbar \omega_0$ və $k_0 T \ll \hbar \omega_s$, onda səpilmə qeyri-elasticdir və $\eta \approx 1$. (4.14.26)-dən:

$$k_0(T_c - T) = \frac{4}{3} E_d \approx E_d. \quad (4.14.28, a)$$

Deməli, bu halda yükdaşıyıcıların dreyflə bağlı olan enerjisi onların xəotik hərəkətlərinin orta enerjisi ilə, dreyf sürətləri isə v_r sürəti ilə eyni tərtibdədir. Ona görə qeyri-elastiklik güclü olduqda gözləmək olar ki, paylanma funksiyasının izotropluğu pozulacaq və o, sahə istiqamətində dartılmış şəkə düşəcək. İndi artıq paylanma funksiyasının antisimmetrik



Şəkil 4.24. [100] oxu istiqamətində GaAs-in zona quruluşu sxemi

hissəsi heç də kiçik əlavə şəklində deyil və kinetik hadisələrdə mühüm rol oynayır. Bu halda (4.14.10) və (4.14.11) münasibətləri ödənilmir. Bəzən təcrübədə elə şərait yaranır ki, paylanma funksiyası maksimal anizotropiyaya malik olur və onu aşağıdakı kimi ifadə etmək lazım gəlir:

$$f(\vec{p}) = \varphi(E) \delta(1 - \cos\theta). \quad (4.14.29)$$

$\varphi(E)$ - yükdaşıyıcıların enerjisindən asılı funksiyadır, analitik şəkli isə kinetik tənliyin həllindən tapılır, θ -impuls və sahənin yaratdığı təsir qüvvəsi vektorları arasındakı bucaqdır. (4.14.29) sahə istiqamətində yönəlmiş nazik iynəşəkili paylanmanı təsvir edir. Ona görə də onu çox vaxt iynəşəkili paylanma adlandırırlar.

§4.15. Qann effekti

Bəzi yarımkəçiricilərdə (qallium arsen, qallium fosfor və s.) qüvvətli elektrik sahəsində yarımtəzlikli cərəyan ossilyasiyası müşahidə olunur. Yarımkəçiriciyə sabit gərginlik tətbiq olunduqda cərəyanın yüksək tezlikli ossilyasiyası (periodik rəqsləri) **Qann effekti** adlanır. Bu hadisənin mexanizmi yarımkəçiricilərdə zona quruluşunun mürəkkəbliyi və zonalararası və ya vadilərarası səpilmə ilə əlaqədardır. n-tip GaAs-də zona quruluşunun sxemi şəkil 4.24.-də göstərilmişdir. Burada \vec{k} dalğa ədədi ilə təyin olunan halların A minimumlarından \vec{k}' dalğa vektoru ilə təyin olunan qonşu B minimumlarına keçidlər mümkündür. A və B minimumları ΔE_1 enerji intervalı ilə fərqlənirlər. A və B vadilərinin əyrilikləri fərqli olduğundan, onlardakı elektronların effektiv kütlələri də fərqlidir. A vadisində elektronların effektiv kütləsi $m_A^* = 0.072 m_0$, B vadisində isə

$m_B^* = 1.2m_0$ -dir. Təbiidir ki, A vadisindəki yüngül elektronların yürüklüyü [$\mu_A \approx 5000 \text{ sm}^2/(\text{V} \cdot \text{san})$], B vadisindəki ağır elektronların yürüklüyündən [$\mu_B \approx 100 \div 200 \text{ sm}^2/(\text{V} \cdot \text{san})$] yüksəkdir.

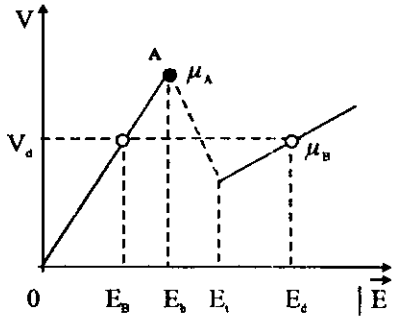
Kiçik xarici sahələr halında elektronlar kristal qəfəslə termodinamik tarazlıqda olur. Adi temperaturalarda istilik hərəkətinin orta kinetik enerjisi $k_0 T \ll \Delta E_1$ olduğundan, elektronlar əsasən A minimumu yaxınlığındakı səviyyələri tuturlar, cərəyan sıxlığı isə yüngül elektronların konsentrasiyası və yürüklüyü ilə təyin olunur:

$$\vec{j} = en_A \mu_A \vec{E}.$$

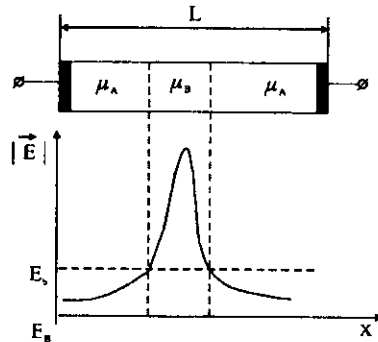
Xarici sahə \vec{E} artdıqca, elektronların sürətləri və enerjiləri artacaq və nəticədə onların bir hissəsi qonşu B səviyyələrinə keçmək imkanı əldə edirlər. Belə keçidlər nəticəsində B minimumunda elektronların effektiv kütlələri daha böyük olduğundan, onların yürüklüyü kəskin azalır, bu isə cərəyan sıxlığının azalmasına səbəb olur (şəkil 4.25.). Buna müvafiq olaraq $\hat{j} = f(u)$, $u \sim \vec{E}$ - volt-ampere xarakteristikasında aşağı düşən hissələr müşahidə olunur.

B minimumunda elektronların halı dayanıqsızdır və onlar fononlarla qarşılıqlı təsire girəcək, aşağı A minimumuna keçirlər. Beləliklə, cərəyanın dayanıqsızlığı baş verir.

Qannın klassik təcrübəsində bu mexanizmi daha ətraflı nəzərdən keçirək. Uclarına xarici gərginlik tətbiq olunmuş çubuqşəkilli L uzunluqlu hər hansı nümunə fərz edək (şəkil 4.26.).



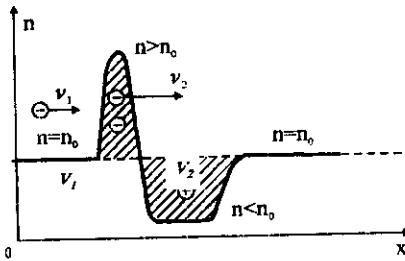
Şəkil 4.25. GaAs-də elektronların hərəkət sürətinin nümunədəki sahə intensivliyindən asılılığı



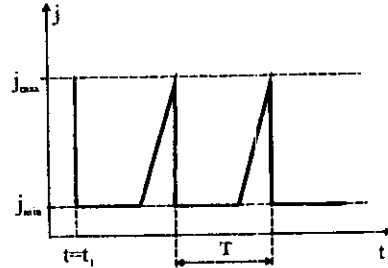
Şəkil 4.26. Qann effektində sahə intensivliyinin nümunədə paylanması

Əgər nümunə bircins olarsa, onda nümunə boyu gərginlik düşgüsü də bərabər paylanır. Amma, məlum olduğu kimi, istənilən nümunədə qeyri-

bircins hissələr mövcud olur ki, bu hissələrdəki elektrik müqaviməti digər hissələrə nəzərən daha böyük olur. Buna müvafiq olaraq hemin hissələrdə gərginlik düşgüsü də artır. Tarazlıq halında təsadüfi qeyri-bircinsliklər sərbəst elektronlar tərəfindən kompensə olunur (ekranlanır). Sahə böyüdükcə, bu sahənin təsiri ilə yüksəkmüqavimətli oblastı ekranlayan sərbəst elektronlar hemin hissədən aparılır və nəticədə bu oblast böyüməyə başlayır. Beləliklə, sahə artdıqca nümunənin ilk növbədə məhz bu hissəsində sahə böhran qiymətinə çatır və elektronların A minimumundan B minimumuna keçidləri baş verir. Bu isə bütün kristalda deyil, məhz bu dar hissədə ağır effektiv kütləli, kiçik yürüklüklü elektronların toplanmasına, və deməli, həmin hissədə müqavimətin artmasına və uyğun olaraq gərginlik düşgüsünün yüksəlməsinə gətirib çıxarır. Nümunə boyu sahənin paylanması qeyri-bircins olur. Ağır elektronların çoxluq təşkil etdiyi belə yaranmış zona elektrik domeni adlanır. Tətbiq olunmuş sahənin təsiri ilə domen nümunə boyu yerdəyişməyə başlayır. Domenden sol və sağ tərəflərdə ağır elektronlara nisbətən daha yüngül elektronlar böyük sürətlə hərəkət edir. Sol tərəfdən onlar domene çataraq daha böyük konsentrasiyalı oblastlar- mənfi həcmi yüklər oblastı yaradırlar. Sağ tərəfdə isə yüngül elektronlar sahə təsiri ilə daha böyük sürətlə hərəkət edib, domenden uzaqlaşır ki, bu da elektronlarla kəsiblaşmış – müsbət həcmi yüklər oblastı yaranmasına səbəb olurlar (şəkil 4.27).



Şəkil 4.27. Elektrik domeninin quruluşu



Şəkil 4.28. Qann effektində cərəyan ossilliyasının yaranması

Xarici sahənin hər bir sabit qiymətində domenin daxilində və xaricindəki elektronların sürətləri arasında müəyyən dinamik tarazlıq yaranır.

Nümunəyə gərginlik verildikdə $t=t_1$ anında cərəyan sıxlığı hər hansı j_{max} maksimum qiymətə qədər qalxır (şəkil 4.28). Dərhal domenin yaranması baş verir, bu proses çox qısa müddət davam edir və cərəyan

dərhal j_{\min} -a kimi azalır ki, bu da domenin qərarlaşmış $\bar{v}_{\text{dom}} \cdot j_{\min} = \text{Sen}_A \bar{v}_d$ sürəti ilə müəyyən olunur, burada S- nümunənin en kəsiyinin sahəsidir. Cərəyanın minimum qiyməti domenin bütün nümunə boyu hərəkəti müddətində dəyişməz qalır: $T = L/v_{\text{dom}}$. Domen nümunənin sonuna (anoda) çatdıqda yox olur və cərəyan j_{\max} -maksimuma kimi artır. Cərəyanın artması, domenin əmələ gəlməsinə nəzərən daha gec baş verir (şəkil 4.28). Domenlərin bu hərəkətləri dövrdə cərəyanın rəqslərinə səbəb olur. İmpulsların davam etmə müddətləri domenlərin nümunədə hərəkət müddəti ilə müəyyən olunur. Nümunənin uzunluğu $L=50$ mkm olduqda, rəqs tezliyi $\sim 2 \cdot 10^9$ Hs olur.

Bu dayanaqsızlıqlar həcmi effekt olduğundan, xarici sahələrin təsirindən asılı deyil. Xarici sahələr domenin hərəkət sürətini dəyişmir ($\sim 10^5$ m/san), yalnız onların qalınlıqlarını dəyişdirir ki, bu da onların «köpməsinə» səbəb olur.

§4.16. Termoelektron ionlaşma hadisəsi

Bu hadisə Frenkel tərəfindən araşdırılmışdır. Elektrik sahəsinin intensivliyini artırıqda ($E \geq 10^6$ V/m) elektrona təsir edən və kristalda elektronun enerji halını dəyişən eE qüvvəsi də artır. Qəfəsin iki qonşu düyününü ayıran potensial çəpərin boyca kiçilməsini

$$\Delta \mathcal{E} = 2eE r_0 \quad (4.16.1)$$

kimi qiymətləndirmək olar. r_0 - elektronun nüvədən olan məsafəsidir və bu məsafədə ən yaxın nüvəyə doğru cazibə qüvvəsi xarici qüvvə ilə tarazlaşır:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} = eE, \quad (4.16.2)$$

buradan

$$r_0 = \sqrt{\frac{e}{4\pi\epsilon_0 E}} \quad (4.16.3)$$

r_0 -m bu ifadəsini (4.16.2) düsturunda nəzərə alaraq potensial çəpərin boyu üçün

$$\Delta \mathcal{E} = 2 \sqrt{\frac{e^3}{4\pi\epsilon_0}} E \quad (4.16.4)$$

alırıq. Bunun nəticəsində elektronu keçirici zonaya keçirmək üçün tələb olunan enerji $\Delta \mathcal{E}$ kəmiyyəti qədər kiçilir, istilik ionlaşma ehtimalı isə artır. Bolsman statistikasına uyğun olaraq termik həyacanlanma ehtimalı

$$e^{\frac{\Delta \mathcal{E}}{kT}} = e^{\beta \cdot \Delta \mathcal{E}} \quad (4.16.5)$$

kəmiyyəti qədər artır. Burada

$$\beta = \frac{2}{k_0 T} \sqrt{\frac{e^3}{4\pi\epsilon\epsilon_0}}$$

Bu zaman yükdaşıyıcıların konsentrasiyası Frenkel qanununa görə

$$n = n_0 e^{\beta\sqrt{E}} \quad (4.16.6)$$

kimi artır. Bu effekt $E = 10^7 + 10^8$ V/m qiymətlərində əsas rol oynayır və temperaturun artması ilə eksponensial artır.

§4.17. Zərbə ilə və elektrostatik ionlaşma

Qüvvətli elektrik sahəsi ($E > 10^6$ V/m) yarımkeçiricinin atomlarının elektronlarına təsir edərək enerji zonalarında səviyyələrin meylinə səbəb olur (şəkil 4.29), belə ki, \bar{E} - intensivlikli xarici elektrik sahəsində elektronun potensial enerjisi onun x koordinatı ilə aşağıdakı kimi müəyyən olunur:

$$\mathcal{E}_1 = -eE_x,$$

bu halda elektronun tam enerjisi isə

$$E_1 = E + \mathcal{E}_1$$

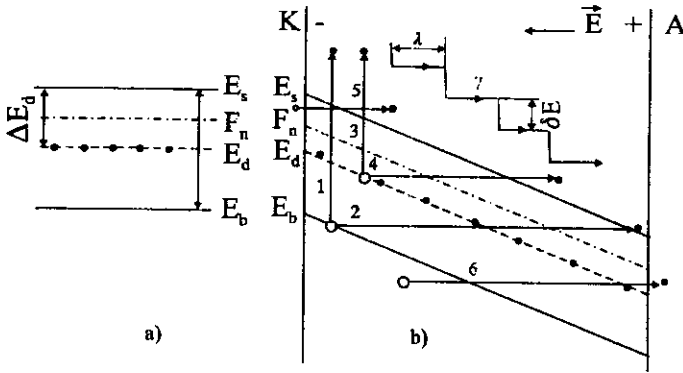
olar. Burada E - xarici sahə olmayan halda elektronun enerjisidir.

Əgər $\mathcal{E}_1 > 0$ olarsa, elektronların enerji səviyyələri qalxır, $\mathcal{E}_1 < 0$ olduqda isə enir, qadağan zonasının eni isə x koordinatının hər bir qiyməti üçün dəyişməz qalır. Məsələn, donor yarımkeçiricisi halında (şəkil 4.29), zonaların meyli nəticəsində elektronlar valent zonasından keçirici zonaya 1 və ya 2 yolu ilə keçə bilərlər. Belə keçidlər donor səviyyəsindən keçirici zonaya 3 və ya 4, katoddan keçirici zonaya 5, valent zonadan anoda isə 6 yolu ilə mümkün olur.

1 və 3 vertikal keçidlərinə enerji sərfi tələb olunur (termoelektron və ya zərbə ilə ionlaşma), 2, 4, 5 və 6 üfqi keçidlərinə isə enerji sərfi və enerjinin dəyişməsi tələb olunmur (tunel keçidi və ya Ziner effekti).

Qüvvətli elektrik sahələrində ($E \sim 10^6 + 10^8$ V/m) sərbəst elektron (və ya dəşik) λ - sərbəst qaçış yolu boyunca hərəkət müddətində aşqar atomunu ionlaşdırmaq üçün ΔE_d və ya qəfəs atomunun ionlaşdırmağa lazım olan ΔE enerjisini qazana və nəticədə elektronu bu səviyyələrdən keçirici zonaya (şəkil 4.29-da 3 və 1 keçidləri) və ya valent zonasından E_s - akseptor səviyyəsinə adlada bilər, bu zaman elektron özü keçirici zonada qalmaq üçün kifayət olan enerjisi saxlayır, daha doğrusu zərbə nəticəsində ionlaşmada elektron ancaq keçirici zona çərçivəsində yuxarı səviyyədən aşağı səviyyəyə yerini dəyişir. Sərbəst elektron keçirici zonada anoda doğru hərəkət edərək aşqar atomu və ya əsas qəfəs atomu

ilə toqquşmada 7 enerji pillələri ilə enir (şəkil 4.29), burada λ - sərbəst qaçış yolunun orta uzunluğu, δE isə elektronun hər toqquşma aktında itirdiyi enerjinin orta qiymətidir.



Şək.4.29. Donor yarımkeçiricinin enerji zonaları:
a- elektrik sahəsi olmadıqda; b- qüvvətli elektrik sahəsində.

Aşqarların aktivləşmə enerjiləri ΔE_d və ΔE_s , adətən, qadağan zonasının ΔE enindən kiçik olduğundan, qüvvətli elektrik sahəsində əvvəlcə aşqar atomları, sonra isə əsas qəfəs atomları ionlaşmağa başlayır. Zərbə ilə ionlaşmalar kristalın lokal qeyri- bircinsliyindən irəli gələn daxili sahələrin təsiri və ya p-n keçidləri nəticəsində də baş verə bilər. Zərbə ilə ionlaşma temperatur və aktivləşmə enerjiləri kiçik, yürüklük böyük olduqca, daha az qüvvətli elektrik sahələrində baş verə bilər.

§4.18. Ziner effekti

Çox qüvvətli elektrik sahələrində ($E_b > 10^9 V/m$) yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının daha bir artma mexanizmi meydana çıxır. Bu **tunel effekti** və ya **Ziner effekti** adlanır.

Sahələrin daha böyük qiymətlərində ($E \geq 10^9 V/m$) elektrostatik ionlaşma, donor səviyyələrindən və valent zonasından keçirici zonaya 2,4 üfiqi keçidləri mümkün olur. Elektrostatik ionlaşma ona görə mümkün olur ki, kifayət qədər qüvvətli elektrik sahələrində elektron enerjisini dəyişmədən, tunel effekti hesabına qadağan zonasını keçmə ehtimalına malikdir.

Məsələn, 2 kimi tunel keçidi üçün xarici sahə intensivliyi \bar{E} olarsa, elektrostatik ionlaşma ehtimalı

$$\omega = \exp \left[\frac{\pi^2 (2m^*)^{1/2} (\Delta E)^{3/2}}{h e E} \right] \quad (4.18.1)$$

kimi qiymətləndirilə bilər.

Tunel keçidlərinin ehtimalı istər valent zonasından keçirici zonaya, istərsə də keçirici zonadan valent zonasına keçidlər üçün eynidir. Anma valent zonasında elektronların konsentrasiyası keçirici zonada olduğundan daha böyükdür və buna görə də nəticədə elektron seli valent zonasından keçirici zonaya doğru yönəlir. Tunel keçidinin ehtimalı yarımkəirici və metal kontaktlarında (5,6 keçidləri), əgər bu zaman potensial çəpərin eni həcmi yüklər hesabına artmırsa, daha böyük ehtimallıdır.

Sahənin intensivliyinin yüksəldməsi ilə ionlaşma hesabına yükdaşıyıcıların əlavə artımı ilə yanaşı əks proses – elektronların dəşiklərlə rekombinasiyası da baş verir. Bu iki proses nəticəsində xarici sahənin hər bir qiymətində yükdaşıyıcıların müəyyən konsentrasiyası qərarlaşır və bu konsentrasiyasının qərarlaşmış qiyməti də sahə intensivliyi artdıqca artır. Xarici sahənin həddən artıq böyük qiymətlərində, əsasən zərbə və elektrostatik ionlaşma hesabına, yükdaşıyıcıların selşəkilli artımı və yarımkəiricilərin dəşilməsi baş verir.

§ 4.19. Volt-ampere xarakteristikası və neqatron effektlər

İzotrop kristallar üçün Om qanununun məlum ifadəsində

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \quad (4.19.1)$$

σ - elektrik keçiriciliyi skalyar kəmiyyətdir. Belə maddələrdə \vec{j} -un \vec{E} -dən asılılığı (VAX), yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, kiçik sahələrdə koordinat başlanğıcından keçən düz xətdir. Ancaq yükdaşıyıcılar qızmar hala keçdikdə VAX xətti asılılıqdan kənara çıxır. Bu halda VAX-larını araşdırmaq üçün diferensial keçiricilik anlayışından istifadə etmək daha əlverişli olur. Sadə halda, σ skalyar kəmiyyət olduqda, diferensial keçiriciliyi (σ_s) aşağıdakı kimi təyin edə bilərik

$$\sigma_s = \frac{dj}{d|E|} = \sigma + |E| \cdot \frac{d\sigma}{d|E|}. \quad (4.19.2)$$

σ -nın yükdaşıyıcıların temperaturundan (T_s) asılılığını nəzərə alsaq:

$$\frac{d\sigma}{d|E|} = \frac{d\sigma}{dT_s} \cdot \frac{dT_s}{d|E|}. \quad (4.19.3)$$

(4.19.3)-ü (4.19.2)-də yerinə yazsaq:

$$\sigma_s = \sigma + |E| \cdot \frac{d\sigma}{dT_s} \cdot \frac{dT_s}{d|E|}. \quad (4.19.4)$$

vek-

$\frac{dT_e}{d|\bar{E}|}$ -ni enerji balansı tenliyindən istifadə edib tapa bilərik. Bunun üçün (4.14.8)-in hər iki tərəfini n -ə vurub, $en\bar{v}_e = \bar{j} = \sigma\bar{E}$ olduğunu nəzərə alaq:

$$\sigma\bar{E}^2 = nk_0 \frac{T_e - T}{\tau_E} \quad (4.19.5)$$

Aşağıdakı kimi övəzətmə apararaq:

$$nk_0 \frac{T_e - T}{\tau_E} = P \quad (4.19.6)$$

Bu övəzləməni (4.19.5)-də yerinə yazsaq:

$$\sigma\bar{E}^2 = P \quad (4.19.7)$$

Aydındır ki, P - vahid zamanda kristalın vahid həcminə xarici sahə tərəfindən verilən enerjidir. (4.19.7)-in hər iki tərəfindən $|\bar{E}|$ -yə görə törəmə alaq:

$$2\sigma|\bar{E}| + \bar{E}^2 \frac{d\sigma}{dT_e} \cdot \frac{dT_e}{d|\bar{E}|} = \frac{dP}{dT_e} \cdot \frac{dT_e}{d|\bar{E}|} \quad (4.19.8)$$

Buradan:

$$\frac{dT_e}{d|\bar{E}|} = \frac{2\sigma|\bar{E}|}{\frac{dP}{dT_e} - \bar{E}^2 \frac{d\sigma}{dT_e}} \quad (4.19.9)$$

Bu ifadəni (4.19.4)-də yerinə yazsaq və $\bar{E}^2 = \frac{P}{\sigma}$ olduğunu da nəzərə alaq:

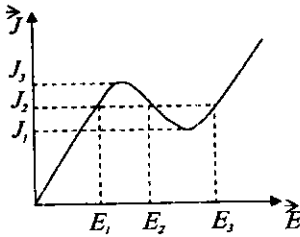
$$\sigma_e = \sigma \frac{\frac{dP}{dT_e} + \frac{P}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT_e}}{\frac{dP}{dT_e} - \frac{P}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT_e}} \quad (4.19.10)$$

Qüvvətli elektrik sahəsində σ -nın \bar{E} -dən asılı olaraq dəyişməsi VAX-ın Om qanununu ifadə edən xətdən ya aşağı düşməsinə ($\frac{d\sigma}{d|\bar{E}|} < 0$, buna subxətti xarakteristika deyirlər) və ya yuxarı qalxmasına ($\frac{d\sigma}{d|\bar{E}|} > 0$, buna superxətti asılılıq deyirlər) səbəb olur. Birinci halda $\left(\frac{d\sigma}{d|\bar{E}|} < 0\right)$ çox vaxt intensivliyin müəyyən artma oblastında keçiricilik elə sürətlə azalır ki,

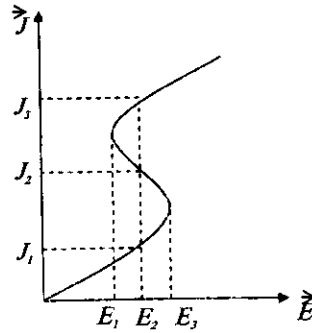
(4.19.1) ifadəsində \bar{E} -nin artmasına baxmayaraq, cərəyan sıxlığı (σE hasil) azalır. Bu oblasta diferensial keçiriciliyin mənfi qiymətləri uyğun gəlir. \bar{E} -nin sonrakı artımı nəticəsində \bar{j} -un azalmasına səbəb olan mexanizmlər aradan qalxır və \bar{j} yenidən artmağa başlayır. 4.30-cu şəkildə bu halda müşahidə olunan tipik VAX-lardan biri göstərilmişdir. Onu N -şəkili VAX adlandırırlar. Cərəyan sıxlığının $j_1 < j_2 < j_3$ intervalında dəyişən hər bir qiymətinə intensivliyin üç müxtəlif qiyməti uyğun gəlir. Bunlardan ikisi VAX-ın artan, biri isə azalan oblastına düşür. İkinci halda

$\left(\frac{d\sigma}{d\bar{E}} > 0\right)$ VAX-ın müəyyən oblastında keçiricilik ehtil sürətlə artır ki,

cərəyan sıxlığının artması ilə nümunədə intensivlik azalır, mənfi diferensial keçiricilik müşahidə olunur. Cərəyan sıxlığının sonrakı artımı yenə də mənfi diferensial keçiricilik yaradan səbəbinin aradan qalxmasına gətirib çıxarır və nəhayət, \bar{E} -in artması ilə \bar{j} da artır. Bu halda VAX-ı S -şəkili xarakteristika adlandırırlar (şəkil 4.31). Burada \bar{E} -nin E_1 -lə E_3 arasında aldığı hər bir qiymətə cərəyan sıxlığının üç müxtəlif qiyməti uyğun gəlir. Onlardan ikisi xarakteristikanın artan, biri isə azalan (\bar{E} -yə görə) hissəsinə düşür.



Şəkil 4.30 N -şəkili VAX



Şəkil 4.31. S -şəkili VAX

Mənfi diferensial müqavimətin (MDM) meydana çıxması ilə bağlı hadisələr **neqatron effektlər** adlanır, MDM strukturlu funksional qurğular isə funksional elektronikanın yeni qolu olan **neqatronikanın** əsasını təşkil edir.

VAX-lar haqqında deyilən mülahizələri (4.19.10) münasibətini araşdırmaqla asanlıqla ala bilərik. Diferensial keçiricilik \bar{j} -un \bar{E} -yə görə birinci tərtib törəməsi olduğu üçün onun qiymət və işarəsini VAX-a hər bir nöqtədə çəkilən toxunanın \bar{E} -nin istiqaməti ilə əmələ gətirdiyi bucağa görə təyin etmək olar. N -şəkilli VAX-da (şəkil 4.30) σ_s sıfırdan keçərək işarəsini dəyişir. S -şəkilli VAX-da isə σ_s sonsuzluqdan keçərək işarəsini dəyişir (şəkil 4.31). Bu isə VAX-ın düşən hissəsinə keçid zamanı (8.19.10)-in uyğun olaraq sürətinin və məxrəcənin sıfıra bərabər olması deməkdir. Bu şərtləri aşağıdakı kimi yazı bilərik:

$$1) N \text{-şəkilli BAX: } \frac{dP}{dT_s} + \frac{P}{\sigma} \cdot \frac{d\sigma}{dT_s} = 0$$

yaxud

$$\frac{d}{dT_s} \ln(\sigma P) = 0, \quad (4.19.11)$$

$$2) S \text{-şəkilli VAX: } \frac{dP}{dT_s} - \frac{P}{\sigma} \cdot \frac{d\sigma}{dT_s} = 0$$

yaxud

$$\frac{d}{dT_s} \ln\left(\frac{P}{\sigma}\right) = 0. \quad (4.19.12)$$

P və σ -nın qiymətlərini yerinə yazıb, müəyyən qruplaşdırma aparsaq, bu ifadələri başqa şəkllə salırıq:

$$N: \quad \frac{n^2 \mu}{\tau_s} + (T_s - T) \frac{d}{dT_s} \left(\frac{n^2 \mu}{\tau_s} \right) = 0, \quad (4.19.13)$$

$$S: \quad 1 - \frac{T_s - T}{\mu \tau_s} \cdot \frac{d}{dT_s} (\mu \tau_s) = 0. \quad (4.19.14)$$

Aldığımız ifadələri açıq şəkildə yazmaq üçün onlara daxil olan parametrlərin T_s temperaturundan asılılığı məlum olmalıdır. Təcrübə tədqiqatları və hesablamalar göstərir ki, bir sıra yarımkeçiricilər üçün (4.19.13) və (4.19.14) münasibətləri doğrudan da ödənilir. Məsələn, n -GaAs kristalında otaq temperaturunda mənfi diferensial keçiricilik sahənin $2,3 \cdot 10^3 \frac{B}{sm}$ qiymətində başlayır və $\sim 10^4 \frac{B}{sm}$ qiymətində yox olur.

Qızıl və mislə aşqarlanmış n -tip germaniumda 77K-dən aşağı temperaturlarda bu effekt daha kiçik elektrik sahələrində müşahidə olunur.

Qeyd etmək lazımdır ki, N və S şəkilli VAX-a malik olan kristallar radiotexnikada müxtəlif məqsədlər üçün istifadə olunan konturların aktiv elementi kimi istifadə olunur və onlarda müəyyən şəraitdə elektrik cərəyanının sönməyən rəqsləri alınır. Bunun üçün, artıq qeyd etdiyimiz kimi, kristal bütün həcmdə bircins olmalıdır. Lakin bütün

həcm üzrə bircins götürülə bilən kristalda belə onu təmsil edən parametrlərin çox kiçik oblastlarda orta qiymətdən kənara çıxmaları mövcuddur. Bunun bir səbəbi kiçik həcmərdə baş verən flüktuasiyalar (yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının, intensivliyin və s.), digər səbəbi isə aşqar mərkəzlərinin və kristaldakı başqa nöqtəvi qüsurların paylanmasındakı qeyri-müntəzəmlikdir. Termodinamik tarazlıqda və ona yaxın hallarda kinetik hadisələrə flüktuasiyaların göstərdiyi təsir nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçikdir. Çünki istilik hərəkətinin yaratdığı kənara çıxmalar (flüktuasiyalar) kiçik olmaqla bərabər, həm də qısa müddətdə sönürlər, güclü flüktuasiyaların başvermə ehtimalı isə olduqca kiçikdir. Yüklü aşqar mərkəzləri və başqa nöqtəvi qüsurlar yükdaşıyıcılar tərəfindən ekranlaşaraq daha da kiçik həcmdə lokallaşırlar. Lakin elektron (deşik) qazı kəskin qızmar hala keçdikdə vəziyyət tamamilə dəyişir. Tədqiqatlar göstərir ki, belə şəraitdə diferensial keçiricilik müəyyən bir xarakteristik qiymətdən (mütləq qiymətcə) böyük olduqda elektron qazı tarazlıq vəziyyətində müşahidə oluna bilməyən tamamilə yeni bir hala keçir və bu halda flüktuasiya nəticəsində fiziki kəmiyyətlərin güclü dayanıqsızlığı baş verə bilər. Burada \bar{j} , n , \bar{E} və T_e -nin elə kənara çıxmaları daha çox diqqət cəlb edir ki, onlar zaman keçdikcə sönmür, daha da güclənir.

Flüktuasiyanın yaratdığı qeyri-bircins halda intensivliyin paylanmasına baxaq. Bunun üçün balans tənliyindən istifadə edək və onu aşağıdakı kimi yazaq:

$$\varepsilon = (\bar{j}\bar{E}) - P = 0. \quad (4.19.15)$$

Yazılışdan aydındır ki, ε vahid zamanda vahid həcmdə yükdaşıyıcıların sahədən aldığı və kristal qəfəsinə verdiyi enerjilərin fərqi. Flüktuasiyalar mühüm rol oynadıqda $\varepsilon \neq 0$ ola bilər. Bu zaman iki hal mümkündür: 1) $\delta\varepsilon$ və δT_e -nin işarəsi bir-birinin əksinədir. Belə kənara çıxmalar inkişaf edib, güclənə bilməzlər. Çünki onlar xarici sahənin iştirakı ilə enerji balansına görə tənzim olunur. Məsələn, temperaturun müəyyən anda δT_e qədər təsadüfi azalması xarici sahədən buna uyğun əlavə enerji götürülməsinə səbəb olur və əksinə. 2) $\delta\varepsilon$ və δT_e -nin işarələri eynidir. Bu halda kənara çıxmalar xarici sahənin hesabına daha da güclənir və artıq yükdaşıyıcılar sisteminin bütün həcm üzrə bircinsliliyi pozulur.

Tutaq ki, cərəyan x oxu istiqamətdə axır və onun flüktuasiyası sıfırdır: $\delta j_x = 0$, temperatur və intensivliyin flüktuasiyası isə sıfırdan fərqlidir, özü də $\delta T_e(x)$ verilmiş x üçün kristalın bütün en kəsiyində sabitdir. (4.19.15) ifadəsini aşağıdakı şəkə salıb, sonra da diferensiallayaq:

$$\varepsilon = \frac{j^2}{\sigma} - P, \quad \text{vek-} \quad (4.19.16)$$

$$d\varepsilon = \frac{2jdj\sigma - j^2 d\sigma}{\sigma^2} - dP = - \left(\frac{dP}{dT_x} + \frac{P}{\sigma} \cdot \frac{d\sigma}{dT_x} \right) dT_x. \quad (4.19.17)$$

$dj=0$ və $j^2 = \sigma^2 |\bar{E}|^2 = \sigma P$ olduğunu nəzərə aldıq. (4.19.17)-i əvəzetmə vasitəsi ilə sadələşdirək:

$$d\varepsilon = -\gamma_1 dT_x, \quad (4.19.18)$$

$$\gamma_1 = \frac{dP}{dT_x} + \frac{P}{\sigma} \cdot \frac{d\sigma}{dT_x}. \quad (4.19.19)$$

(4.19.18)-dən görüldüyü kimi, $\gamma_1 > 0$ olduqda yuxarıda baxdığımız birinci hal, $\gamma_1 < 0$ olduqda isə ikinci hal həyata keçməlidir. γ_1 -in ifadəsi diferensial keçiriciliyin (4.19.11) düsturundakı kəsrin surəti ilə eynidir. Onda γ_1 və σ_x eyni zamanda sıfıra bərabər olur və eyni zamanda işarələrini dəyişir. Deməli, bu hal VAX N -şəkilli olan kristallarda yaranır. $\gamma_1 < 0$ qiymətlərində yükün sıxlığının və intensivliyinin x komponentinin flüktuasiyası qüvvətlənir və onlar bütün həcm üzrə qeyri-müntəzəm paylanır, kristalın bütün həcmi zəif və qüvvətli sahələr olan hissələrə bölünür. Elektrik sahəsinin qüvvətli olduğu hissəyə qüvvətli sahə domeni, yaxud sadəcə elektrik domeni deyirlər. Domenin daxilində elektrik sahəsinin paylanması kristalın təbiətindən asılıdır və ümumiyyətlə, qeyri-müntəzəmdir. Zəif sahə oblastlarında isə elektrik sahəsi müntəzəm paylanır və elektron qazı burada demək olar ki, qızmar halda deyil. Nümunədə eyni zamanda bir neçə domen də yarana bilər. Lakin hesablamalar göstərir ki, onlar ayrı-ayrılıqda mövcud ola bilmirlər və birləşib vahid bir domene çevrilirlər.

İndi də cərəyan sıxlığının flüktuasiyasına baxaq. Tutaq ki, yökdəyiçilər sisteminin temperaturu x oxu boyunca müntəzəm olan $\delta T_x(y, z)$ flüktuasiyasına və ona görə də cərəyan sıxlığı $\delta j_x(y, z)$ flüktuasiyasına məruz qalmışdır. İntensivlik flüktuasiyasını sıfır qəbul edək ($\delta E_x = 0$). Bu hal üçün (4.19.15) ifadəsini aşağıdakı şəkildə yazmaq daha məqsəduyğundur:

$$\varepsilon = \sigma E_x^2 - P \quad (4.19.20)$$

Əvvəlki qayda ilə buradan alarıq:

$$d\varepsilon = E_x^2 d\sigma + 2E_x dE_x \sigma - dP = -\gamma_2 dT_x, \quad (4.19.21)$$

$$\gamma_2 = \frac{dP}{dT_x} - \frac{P}{\sigma} \frac{d\sigma}{dT_x}. \quad (4.19.22)$$

$dE_x \neq 0, E_x^2 = \frac{P}{\sigma}$ yazdıq. (4.19.22)-dən aydındır ki, $\gamma_2 > 0$ olduqda flüktuasiya sönür və $\gamma_2 < 0$ olduqda güclənir. (4.19.10)-lə müqayisədən məlum olur ki, $\gamma_2 \sigma_d$ -nin ifadəsindəki kəsrin məxrəci ilə eynidir. γ_2 və σ_d -nin qiymət və işarələrinin uzunluğundan aydın olur ki, bu hal S -şəkili VAX-a malik olan kristallarda baş verir. Deməli, S -şəkili VAX müşahidə olunarkən cərəyan sıxlığının və temperaturun cərəyanıya perpendikulyar istiqamətindəki kənar çıxmaları daha maraqlıdır. Çünki onlar inkişaf edərək, kristalın bütün həcmi güclü və zəif cərəyanlı hissələrə bölür. Cərəyanı güclü olan hissəni müstəvi təbəqə kimi də təsəvvür etmək olar. Lakin hesablamalar göstərir ki, bu cür cərəyan layları dayanıqsız olur və onlar dəyişərək silindr şəklinə düşür. Bunu cərəyan çıxırı adlandırırlar.

V FƏSİL.

YÜKDAŞIYICILARIN KRISTALLARDA SƏPİLMƏSİ

§5.1. Səpilmənin effektiv kəsiyi

Məlumdur ki, termodinamik tarazlıq halında kristalda elektrik cərəyanı sıfıra bərabərdir. İdeal qüsursuz kristalı elektrik sahəsinə daxil edib, sonra bu sahəni aradan götürsək, yükdaşıyıcıların istiqamətlənmiş hərəkəti arası kəsilmədən davam etməlidir. Təbiətdə ideal qüsursuz kristal mövcud olmadığı üçün bu mənzərəni müşahidə etmək mümkün deyil. Müşahidələr göstərir ki, real kristallarda xarici sahəni kəsdikdə çox qısa bir müddətdə (10^{-13} san) elektrik cərəyanı da sıfıra qədər azalır. Bu azalma eksponensial qanunla baş verir:

$$\vec{j} = \vec{j}_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (5.1.1)$$

Burada j_0 - cərəyanın sahə kəsilən ana ($t=0$) uyğun gələn qiymətidir, τ isə qiyməti 10^{-13} san tərtibində olan kəmiyyətdir (τ -relaksasiya müddətidir).

Yuxarıda qeyd etmişdik ki, sistemin tarazlığa qayıtmasını təmin edən səbəb, yükdaşıyıcıların kristal qəfəsinin hər cür qüsurlarından səpilməsidir. Əksər hallarda səpilən zərrəciyin enerjisinin dəyişməsi nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik olur (elastiki səpilmə). Bu halda səpici mərkəzin rolu yükdaşıyıcının kvazi-impulsunu dəyişdirməkdən ibarət olur. Adətən səpilmə prosesi səpilmənin effektiv kəsiyi adlanan kəmiyyətlə təyin olunur. Bu anlayışı daxil etmək üçün tutaq ki, hər hansı səthə dəstədə konsentrasiyası n_1 və sürəti ν olan zərrəciklər seli düşür. Vahid zamanda vahid səthə perpendikulyar istiqamətdə düşən zərrəciklərin sayına (n) zərrəciklərin selinin sıxlığı deyək:

$$n = n_1 |\vec{\nu}|. \quad (5.1.2)$$

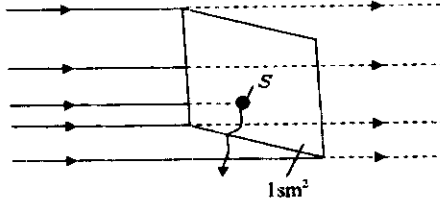
Vahid zamanda vahid səthə bir zərrəcik düşürsə ($n=1$) onda belə selə vahid zərrəcikli sel deyəcəyik. Bu halda

$$n_1 \nu = 1 \left(\frac{1}{\text{sm}^2 \cdot \text{san}} \right); \quad n_1 = \frac{1}{\nu} (\text{sm}^{-3}).$$

İndi götürdüyümüz vahid səth daxilində sahəsi s -ə bərabər və zərrəcik üçün qeyri-şəffaf olan bir ekran yerləşdirək (şəkil 5.1). Vahid zərrəcikli selə zərrəcik labüd olaraq baxdığımız vahid səthə düşürsə, onda onun qeyri-şəffaf s ekranına düşmə ehtimalı $s:1=s$ olar. Hər dəfə zərrəciyin ekrana düşməsi onu dəstədən çıxarırsa, onda s zərrəciyin səpilmə ehtimalı olacaq. Deməli «ekranın» sahəsini bilməklə bir zərrəciyin səpilmə ehtimalını bilmiş olarıq, ona görə də s səpilmənin effektiv

kəsiyi adlanır. «Ekranların» sayı N' olsa, onlarla toqquşma ehtimalı da N' dəfə çox olar: sN' . Vahid zamanda vahid səthə düşən zərrəciklərin sayı bir deyil, n olsa, onda vahid zamanda səpilən zərrəciklərin sayı:

$$\Delta n = nN's.$$



Şəkil 5.1. Zərrəciyin qeyri-səffaf s ekranından səpilməsi

Zərrəciklər maddənin (bərk cismin) daxilində hərəkət edirsə, onda səpici mərkəzlərin həcm sıxlığını (konsentrasiyasını) bilmək tələb olunur. Bu konsentrasiyanı səth konsentrasiyasından fərqləndirmək üçün N -lə işarə edək. En kəsiyi vahid olan zərrəcik dəstəsi dx məsafəsində ($dx \cdot 1 \cdot n$) səpici mərkəzlə rastlaşacaq. x nöqtəsində zərrəciklərin selinin sıxlığı $n(x)$ -dirsə, onda vahid zamanda dx məsafəsində səpilən zərrəciklərin sayı:

$$dn = -n(x)Nsdx, \quad (5.1.3)$$

burada mənfi işarəsi $dn < 0$ olduğu üçün yazılmışdır. Çünki səpilmə nəticəsində dəstədə olan zərrəciklərin sayı azalır:

$$dn = n(x + dx) - n(x) < 0.$$

(5.1.3) sadə diferensial tənlikdir və N -lə, s -dən asılı olmadıqda həlli belədir:

$$n = n_0 e^{-Nx}, \quad (5.1.4)$$

n -in $x=0$ -dakı qiyməti n_0 -la işarə edilmişdir. Buradan görünür ki, zərrəciyin səpilmə ehtimalı (s) məlumdursa, istənilən nöqtədə zərrəciklərin selini tapa bilərik. (5.1.4)-dən görüldüyü kimi, bu qiymət x -dən asılı olaraq eksponensial azalır. $x = l/(Ns)$ məsafəsində seldə olan zərrəciklərin sayı e dəfə azalır. $l/(Ns)$ kəmiyyətinin başqa əyani fiziki mənası da var. Bunu müəyyən etmək üçün n_0 zərrəciyin hamısının səpilmədən qət etdiyi sərbəst yolun orta qiymətini l hesablayaq. ($x, x + dx$) intervalında dn zərrəcik səpilir. Bu zərrəciklərin hamısı x məsafəsini qət

edib (səpilmədən) və $dx \rightarrow 0$ olduqda onların hamısının birlikdə keçib getdiyi yol $(-dn \cdot x)$ -dir. Onda:

$$l = \frac{1}{n_0} \int_0^{\infty} (-dnx). \quad (5.1.5)$$

dn -in qiymətini (5.1.4)-dən tapıb (5.1.5)-də yerinə yazaq:

$$l = \frac{sN}{n_0} \int_0^{\infty} n_0 e^{-sNx} dx = \frac{1}{sN} \int_0^{\infty} (Nsx) e^{-sNx} d(sNx) = \frac{1}{Ns}. \quad (5.1.6)$$

Hesablamanı asanlaşdırmaq üçün $sNx = y$ əvəz edib, bir dəfə hissə-hissə inteqrallamaq lazımdır. Deməli, $l/(Ns)$ -in mənası zərrəciklərin sərbəst yolunun orta uzunluğu oldu.

Bir zərrəciyin dx və l məsafəsində səpilmə ehtimallarının nisbəti $\frac{dx}{l}$ olar. Digər tərəfdən, l məsafəsində zərrəciyin səpilməsi labüd

hədəsədir, onun ehtimalı vahiddir. Onda $\frac{dx}{l}$ elə bir zərrəciyin dx

məsafəsində səpilmə ehtimalıdır. Əgər $dx=1$ olsa: $\frac{dx}{l} = \frac{1}{l} = sN$ - bir zərrəciyin vahid məsafədə səpilmə ehtimalı olar. Bu kəmiyyəti relaksasiya müddəti ilə də əlaqələndirə bilərik:

$$\tau = \frac{1}{\nu} = \frac{1}{sN\nu}. \quad (5.1.7)$$

Biz burada məsələni çox sadələşdirdik, s kəmiyyətini səpici «ekranın» sahəsi kimi götürdük. Əslində bərk cismin daxilində baş verən səpilmə hadisəsi xeyli mürəkkəbdir. Kristal potensialının ideal periodikliyinə istənilən cür pozğunluğu özünü səpilmə mərkəzi kimi aparır, yükdaşıyıcılar bu mərkəzlərlə qarşılıqlı təsir nəticəsində bir haldan başqa hala keçmiş olur. Bu qarşılıqlı təsir müəyyən ehtimalla baş verir. Kvant mexanikasında belə proseslər keçid ehtimalı (W) ilə xarakterizə olunur. Səpici mərkəzi sahəsi $s^* = W$ olan qeyri-şəffaf «ekranla» əvəz etsək, onda həmin mərkəzdən və «ekrandan» səpilmə ehtimalı bərabər olar. Ona görə də çox vaxt **səpilmə ehtimalını səpilmənin effektiv kəsiyi** adlandırırlar.

Eyni zamanda bir neçə növ (I növ) səpici mərkəz mövcuddursa, onda asılı olmayan hadisələrin eyni zamanda başvermə ehtimalının xassəsindən istifadə etsək, ümumi səpilmə ehtimalı üçün alarıq:

$$W = s^* = \sum_i s_i^* N_i. \quad (5.1.8)$$

Digər tərəfdən W -ni sərbəst yolun orta uzunluğu vasitəsilə də ifadə edə bilərik: $l = \frac{1}{W}$, eləcə də $s_i^* N_i = \frac{1}{l}$. Onda:

$$\frac{1}{l} = \sum_i \frac{1}{l_i}, \quad (5.1.9)$$

yəni bir neçə səpilmə mexanizmi mövcud olduqda yükdaşıyıcının sərbəst yolunun uzunluğunun tərs qiyməti ayrı-ayrı mexanizmlər üçün sərbəst yolun uzunluğunun tərs qiymətlərinin cəminə bərabərdir. Deməli, bir neçə səpilmə mexanizmi eyni zamanda təsir etdikdə sərbəst yolun uzunluğu ayrı-ayrı mexanizmlərin hər birindəkindən kiçik olur. Hər bir səpilmə mexanizminin ümumi l -ə verdiyi payı tapmaq üçün uyğun səpici mərkəzlərin konsentrasiyasını və effektiv kəsiyini bilmək lazımdır. Effektiv kəsik isə öz növbəsində yükdaşıyıcının enerjisindən, effektiv kütləsindən və ya səpici mərkəzi xarakterizə edən başqa parametrlərdən asılı ola bilər. Səpilmə nəzəriyyəsinin məqsədi bu asılılığı tapmaqdan ibarətdir.

Daha bir cəhəti aydınlaşdırıq. Biz səpilmənin s' effektiv kəsiyini daxil edərkən, onu zərrəciyin öz əvvəlki istiqamətindən meyl etməsi ehtimalına bərabər seçdik və burada səpilmənin hansı bucaq altında baş verməsi ilə maraqlanmadıq. Lakin çox vaxt səpilmə anizotrop olur, onun başvermə ehtimalı səpilmənin istiqamətindən asılı olur. Aydın ki, səpilmə statistik proses olduğu üçün müxtəlif zərrəciklərin səpilmə istiqamətləri də müxtəlif θ və φ bucaqları ilə xarakterizə olunacaq. Ona görə effektiv kəsiyi əslində elə seçməliyik ki, o, səpilmə bucağından asılı olsun. Bunun üçün sferik koordinat sistemindən istifadə edək və polyar z oxunu zərrəciyin səpilmədən əvvəlki hərəkəti istiqamətində seçək. Tutaq ki, vahid zamanda dz məsafəsində $d\Omega$ cisim bucağı elementindən ($d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$) səpilən zərrəciklərin sayı dn' -dir. dn' düşən seldəki zərrəciklərin sayı n , səpici mərkəzlərin konsentrasiyası N , dz məsafəsi və $d\Omega$ cisim bucağı ilə düz mütənasibdir:

$$dn' = \sigma n N d\Omega dz, \quad (5.1.10)$$

burada σ -mütənasiblik əmsəlidir, özü də θ və φ bucaqlarından asılıdır. (5.1.10)-dan:

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn'}{n N d\Omega dz}, \quad (5.1.11)$$

əgər $N=1$, $d\Omega=1$, $dz=1$ olsa, $\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn'}{n}$ olar. Deməli, $\sigma(\theta, \varphi)$ vahid zamanda vahid məsafədə vahid zərrəcikli seldə ($n=n$, $\nu=1$) bir zərrəciyin bir səpici mərkəzdən θ, φ bucaqları altında səpilmə ehtimalıdır. (5.1.11)-dən aydındır ki, σ -nın vahidi sahə vahididir:

$$[\sigma(\theta, \varphi)] = \frac{1 \cdot \frac{1}{sm^2 \cdot san}}{\frac{1}{sm^2 \cdot san} \cdot \frac{1}{sm^2} \cdot sm} = sm^2 = [L^2]. \quad (5.1.12)$$

Ona görə də $\sigma(\theta, \varphi)d\Omega$ səpilmənin diferensial effektiv kəsiyi adlandırılır. Onu tam (4π) həcm bucağı (bütün fəza) üzrə inteqrallasaq, səpilmənin tam effektiv kəsiyini (s^*) alarıq:

$$\int_{(4\pi)} \sigma(\theta, \varphi)d\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sigma(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta = s^*. \quad (5.1.13)$$

Bu ifadə həm də $\sigma(\theta, \varphi)$ üçün normalama şərtidir. s^* -a səpilmənin integral effektiv kəsiyi də deyilir. Səpilmə izotrop olduqda σ bucaqlardan asılı deyil. Onda (5.1.13)-dən:

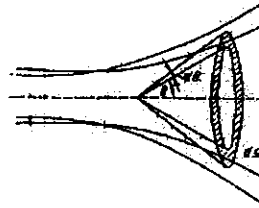
$$s^* = 4\pi\sigma \quad \text{və ya} \quad \sigma = \frac{s^*}{4\pi}. \quad (5.14)$$

Səpici mərkəz ox simmetriyasına malikdirsə, onda o yalnız polyar bucaqdan (θ) asılı olur və təpə bucaqları 2θ və $2(\theta + d\theta)$ olan iki konusun arasında qalan cisim bucağından səpilmə ehtimalını xarakterizə edir (şəkil 5.2). Bu hal üçün φ -yə görə inteqrallama aparsaq:

$$\int_0^{2\pi} \sigma(\theta) \sin\theta d\theta d\varphi = \sigma(\theta) \cdot 2\pi \sin\theta d\theta = \sigma(\theta)d\Omega, \quad (5.1.15)$$

burada $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ - iki konus arasında qalan cisim bucağıdır.

Yükdaşıyıcıların səpilməsi zamanı onların səpici mərkəzlərlə toqquşması elastiki və ya qeyri-elastiki olur. Toqquşmada iştirak edən zərrəciklərin ümumi kinetik enerjisi saxlanılırsa, səpilmə elastiki, saxlanılmırsa (artırırsa və ya azalırsa) – qeyri-elastiki adlanır. Biz əsasən elastiki səpilməyə baxacağıq. Elektron və ya dəşik kristal qəfəsində, məsələn, hər



Şəkil 5.2. Səpilmənin konusvari cisim bucağı

hansı aşqar atomu (ionlaşmış və ya neytral) ilə toqquşduqda adətən səpilmə elastiki olur. Aşqar atomunu sükunətdə qəbul etsək (istilik rəqsini nəzərə almasaq), onda səpilmə zamanı yükdaşıyıcının kinetik enerjisi praktiki olaraq dəyişmir. Bunu göstərmək üçün kvazi-impulsun və enerjinin saxlanma qanunundan istifadə edək. Yükdaşıyıcının kütləsini m , zərbəyə qədər kvazi-impulsunu \vec{p}_1 , kinetik enerjisini T_1 , zərbədən sonra - \vec{p}_2, T_2 və aşqar mərkəzinin kütləsini M , zərbədən sonra impulsunu

ve kinetik enerjisini \bar{P} və T (zərbədən əvvəl $\bar{P}=0, T=0$) ilə işarə edək. Onda impulsun və enerjinin saxlanması qanunlarından yazıla bilər:

$$\begin{aligned}\bar{p}_1 &= \bar{p}_2 + \bar{P}, \\ T_1 &= T_2 + T,\end{aligned}\quad (5.1.16)$$

$$T_1 = \frac{p_1^2}{2m}, \quad T_2 = \frac{p_2^2}{2m}, \quad T = \frac{P^2}{2M}. \quad (5.1.17)$$

Birinci ifadədən P -ni tapıb, ikincidə yerinə yazsaq:

$$\frac{p_1^2}{2m} = \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2M} [p_1^2 - 2(\bar{p}_1 \bar{p}_2) + p_2^2]. \quad (5.1.18)$$

\bar{p}_1 -lə \bar{p}_2 arasında qalan bucaq səpilmə bucağıdır, onu θ ilə işarə etmişik. Onda $(\bar{p}_1 \bar{p}_2) = p_1 p_2 \cos \theta$. Bunu nəzərə alıb, (5.1.18)-i p_2 -nin üstlərinə görə tənlik şəklində yazsaq:

$$p_2^2 - \frac{2p_1 \cos \theta}{1 + \frac{M}{m}} p_2 + \frac{1 - \frac{M}{m}}{1 + \frac{M}{m}} p_1^2 = 0. \quad (5.1.19)$$

Bu kvadrat tənliyi p_2 -yə görə həll edək:

$$p_2 = \frac{p_1 \cos \theta}{1 + \frac{M}{m}} \pm \sqrt{\frac{p_1^2 \cos^2 \theta}{\left(1 + \frac{M}{m}\right)^2} - \frac{1 - \frac{M}{m}}{1 + \frac{M}{m}} p_1^2} = \frac{p_1}{1 + \frac{M}{m}} \left(\cos \theta \pm \sqrt{\frac{M^2}{m^2} - \sin^2 \theta} \right), \quad (5.1.20)$$

burada $M \gg m$ olduğu üçün $\frac{M^2}{m^2} \gg \sin^2 \theta$. Onda $\sin^2 \theta$ -ni $\frac{M^2}{m^2}$ -ə nisbətən nəzərə almaya bilərik, həm də kvadrat kökün qarşısındakı mənfi işarəsini fiziki mənə vermədiyinə görə (həmişə $p_2 > 0$ -dır) atsaq:

$$p_2 = \frac{\cos \theta + \frac{M}{m}}{1 + \frac{M}{m}} p_1 = \left(1 - \frac{1 - \cos \theta}{1 + \frac{M}{m}} \right) p_1 \approx \left[1 - \frac{m}{M} (1 - \cos \theta) \right] p_1. \quad (5.1.21)$$

Axırıncı ifadədə biz məxrəcdə $1 - \frac{M}{m}$ -ə nisbətən çox kiçik olduğu üçün

$\left(\frac{M}{m} \gg 1\right)$, çünki elektronun kütləsi atomun kütləsinə nisbətən çox-çox kiçikdir) nəzərə almadıq. Nəhayət:

$$p_1 - p_2 = p_1 \frac{m}{M} (1 - \cos \theta). \quad (5.1.22)$$

İndi yükdaşıyıcının səpilmə nəticəsində kinetik enerjisinin dəyişməsinə (ΔT) tapasaq:

$$\begin{aligned}\Delta T &= T_1 - T_2 = \frac{1}{2m}(p_1^2 - p_2^2) = \frac{1}{2m}(p_1 + p_2)(p_1 - p_2) = \\ &= \frac{1}{2m} 2p_1 p_1 \frac{m}{M}(1 - \cos\theta) = T_1 \frac{2m}{M}(1 - \cos\theta).\end{aligned}\quad (5.1.23)$$

Bu ifadəni alarkən $p_1 + p_2 \approx 2p_1$ qəbul etdik. Çünki, (5.1.22)-dən görüldüyü kimi, $\Delta p, p_1$ -ə nisbətən çox kiçik kəmiyyətdir. Beləliklə, səpilmə zamanı yükdaşıyıcının səpici mərkəzə verdiyi kinetik enerji θ -dan asılıdır. $\theta = 0$ olanda $\Delta T = 0$, yəni bu halda zərrəcik səpilmir. $\theta = \pi$ olduqda ΔT ən böyük qiymət alır:

$$\Delta T = T_1 \frac{4m}{M}.$$

Səpilmə zamanı səpici mərkəzə verilən kinetik enerjinin orta qiymətini tapaq. Bunun üçün statistik orta qiymətin hesablanma qaydasından istifadə edək. ΔT -ni səpilmə ehtimalına vurub, tam cisim bucağı üzrə inteqrallayaq və həm də normalama şərtini nəzərə alaq:

$$\langle \Delta T \rangle = \frac{\int_0^\pi \Delta T \sigma(\theta) d\Omega}{\int_0^\pi \sigma(\theta) d\Omega} = \frac{T_1 \cdot \frac{2m}{M} \int_0^\pi (\sigma(\theta) - (1 - \cos\theta)) d\Omega}{s^*} = T_1 \frac{2m}{M} \cdot \frac{\sigma_c}{s^*}. \quad (5.1.24)$$

Burada:

$$\sigma_c = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta. \quad (5.1.25)$$

$(1 - \cos\theta)$ çəki funksiyasına görə ortalaşdırılmış diferensial effektiv kəsikdir. σ_c -ni köçürmə (transport) effektiv kəsiyi və ya keçiricilik effektiv kəsiyi də adlandırılır. $(1 - \cos\theta)$ çəki funksiyası $\sigma(\theta)$ -nın σ_c -yə kiçik səpilmə bucaqlarında verdiyi payı azaldır, böyük bucaqlarda isə artırır. Bu, ona görə belədir ki, böyük səpilmə bucaqlarında səpici mərkəzə verilən kinetik enerji də çox olur. Səpilmə izotrop olsa:

$$\sigma_c = 2\pi\sigma \int_0^\pi (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta = 4\pi\sigma = s^*. \quad (5.1.26)$$

Onda (5.24)-dən:

$$\langle \Delta T \rangle = \frac{2m}{M} T_1. \quad (5.1.27)$$

$\frac{m}{M} \sim 10^{-4}$ və hətta ondan da kiçik olduğu üçün aydın olur ki, bu cür səpilmə zamanı zərrəciyin kinetik enerjisinin dəyişməsi nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçikdir.

Göstərmək olar ki, σ_c -nin daha əyani fiziki mənası var. Bundan ötrü elektronun istiqamətlənmiş sürətinin dəyişməsinə baxaq.

İstiqamətlənmiş hərəkətdə səpilmədən əvvəl zərrəcik z oxu istiqamətdə v_z sürəti ilə hərəkət edir. Səpilmə zamanı hərəkətin itiqaməti θ bucağı qədər dəyişəcək (şəkil 5.3). Bu zaman gördük ki, impulsun modulu və kinetik enerji çox cüzi dəyişir. Ona görə səpilmədən sonra elektronun sürətinin modulu $|\vec{v}'|$ elə sürətin əvvəlki qiymətinə bərabər olacaq:

$$|\vec{v}'| = v_z.$$

Digər tərəfdən $v'_z = v' \cos \theta$. Səpilmə nəticəsində istiqamətlənmiş sürətin dəyişməsi:

$$\Delta v_z = v_z - v'_z = v_z - v' \cos \theta = v_z (1 - \cos \theta). \quad (5.1.28)$$

Δv_z -in statistik orta qiymətini hesablayaq:

$$\begin{aligned} \langle \Delta v_z \rangle &= \frac{1}{s^*} \int_0^\pi \Delta v_z \sigma(\theta) \cdot 2\pi \sin \theta d\theta = \frac{1}{s^*} \cdot v_z 2\pi \times \\ &\times \int_0^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta = v_z \cdot \frac{\sigma_c}{s^*}. \end{aligned} \quad (5.1.29)$$

Buradan:

$$\frac{\langle \Delta v_z \rangle}{v_z} = \frac{\sigma_c}{s^*}. \quad (5.1.30)$$

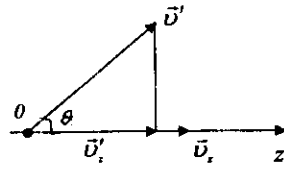
Deməli, σ_c səpilmə zamanı bir toqquşma nəticəsində istiqamətlənmiş sürətin hansı hissəsinin dəyişməsinə göstərir. $\frac{\sigma_c}{s^*}$ düzgün kəsr olduğu üçün onu belə yazı bilərik:

$$\frac{\sigma_c}{s^*} = \frac{1}{q}. \quad (5.1.31)$$

Deməli:

$$\frac{v_z}{\langle \Delta v_z \rangle} = q. \quad (5.1.32)$$

Hər toqquşma aktında $\langle \Delta v_z \rangle$ qədər sürət itirsə (səpici mərkəzə verilir), onda q , istiqamətlənmiş hərəkət sürətinin (v_z) tam itməsi üçün lazım olan toqquşmaların sayını göstərir. İzotrop səpilmə zamanı, (5.1.26)-dan görüldüyü kimi, $\sigma_c = s^*$ yə $q = 1$. Deməli, izotrop səpilmədə yalnız bir zərbə nəticəsində istiqamətlənmiş sürət tamamilə itir (istilik hərəkətinə uyğun gələn sürət qalır). Aydınır ki, bu cür səpilmədə relaksasiya müddətini (τ) sərbəst yolu getmək üçün lazım olan zamana bərabər götürmək olar.



Şəkil 5.3. Səpilmə zamanı elektronların istiqamətlənmiş sürətinin dəyişməsi

Real kristal qəfəsində mümkün olan qüsurları biz göstərmişdik (bax:II fəsil). Həmin qüurlara uyğun səpilmə mexanizmləri də mövcuddur. Yükdaşıyıcıların səpilməsinə səbəb olan mərkəzlər bunlardır: 1) ionlaşmış aşqar atomları, 2) kristal qəfəsinin istilik rəqsləri, 3) neytral aşqar atomları, 4) vakansiya və başqa nöqtəvi defektlər, 5) dislokasiya, 6) kristalın sərhədləri, polikristal maddədə ayrı-ayrı kristalcıqların sərhədi və onların bitişmə müstəviləri, 7) yükdaşıyıcılar və s. Kinetik hadisələrin gedişinə hər bir səpilmə mexanizminin təsiri müxtəlifdir. Bu təsiri tapmaq üçün ayrı-ayrı səpilmə mexanizminə uyğun gələn mərkəzlərin effektiv kəsiyini və konsentrasiyasını bilmək lazımdır. Biz ayrı-ayrı mexanizmlərin ümumi səpilməyə verdiyi pay haqda təsəvvür yaratmaq üçün sərbəst yolun uzunluğunun qiymətini təqribi yolla hesablayaq (tərtibini qiymətləndirək). Aydındır ki, sərbəst yolun uzunluğu kiçik olduqca müvafiq səpilmə mexanizminin rolu böyük olur.

İonlaşmış aşqar mərkəzi üçün s^* -u qiymətləndirək. Tutaq ki, bu mərkəzlər bütün həcmdə bərabər paylanıb və onların konsentrasiyası $N_1 = 10^{16} \text{ sm}^{-3}$ -dür. Eyni işarəli yüklərin elektrik sahəsi bir-birini dəf edir və ona görə də hər bir ionun yaratdığı sahə onun ən yaxın qonşusunadək olan məsafənin yarısına qədər yayılır. Onda belə təsəvvür edə bilərik ki, hər kub santimetrde 10^{16} lokal səpici sahə var və bunların fəzada (kristal qəfəsində) tutduqları həcmə eynidir. Onların hər birini tili a -ya bərabər olan kiçik kub kimi götürə bilərik. 1 sm^3 -də N_1 belə kub olduğu üçün:

$$a^3 N_1 = 1, \quad a = \frac{1}{\sqrt[3]{N_1}} = \frac{1}{\sqrt[3]{10^{16}}} = \frac{1}{2 \cdot 10^5} = 5 \cdot 10^{-6} (\text{sm});$$

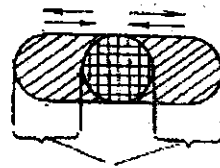
$$s_1^* = a^2 = 2,5 \cdot 10^{-11} \text{ sm}^2; \quad l_1 = \frac{1}{s_1^* N_1} = \frac{1}{2,5 \cdot 10^{-11} \cdot 10^{16}} \text{ sm} = 4 \cdot 10^{-6} \text{ sm}.$$

Bu işə kifayət qədər kiçik kəmiyyətdir.

Kristal qəfəsinin istilik rəqslərinin yaratdığı səpilməni qiymətləndirmək üçün nəzərə alaq ki, ideal qüsursuz kristal qəfəsində səpilmə yoxdur, yəni kristal qəfəsinin düyün nöqtələrində atomları möhkəm bağlanmış (sükunətdə) götürsək, onlar heç bir səpilmə yaratmaz.

Lakin istilik hərəkəti nəticəsində atomlar öz tarazlıq vəziyyəti ətrafında

rəqs etdiyindən yükdaşıyıcıların səpilməsinə səbəb olur. Deməli, s^* -u qiymətləndirərkən atomun özünün ən kəsiyinin sahəsini deyil, yalnız onun tarazlıq vəziyyətindən kənara çıxdıqda ördüyü sahəni götürəcəyik (şəkil 5.4). Bu sahə atomun diametrinin rəqs amplitudunun iki mislinə



Rəqsin amplitudu

Şəkil 5.4. Effektiv kəsiyin qiymətləndirilməsi

hasilinə bərabərdir. Amplitudun iki mislini $l_A = 10^{-8} sm$ tərtibində, atomun ölçüsünü $\sim 10^{-8} sm$ götürsək, onda $s_T^* = 10^{-8} \cdot 10^{-8} sm = 10^{-16} sm^2$, görəyik ki, istilik rəqsləri üçün s^* ən kiçik qiymətə malikdir. Bu cür mərkəzlərin özünün konsentrasiyası çox böyükdür. Kristal qəfəsində $1 sm^3$ -də olan atomların sayı $N_T \sim 10^{22} (sm^{-3})$. Ona görə də bu halda səpilmə ehtimalı daha çoxdur:

$$l_T = \frac{1}{s_T^* N_T} \sim \frac{1}{10^{-16} \cdot 10^{22}} sm = 10^{-6} sm.$$

Neytral aşqar atomları və kristal qəfəsinin digər nöqtəvi qüsurlarının yaratdığı səpilməni qiymətləndirmək üçün düşünmək olar ki, bu cür mərkəzlərin yaratdığı pozğunluq bir elementar özəyi əhatə edir. Onda belə qüsurlar üçün s^* -u elementar özəyin bir uzununun sahəsinə bərabər götürmək olar:

$$s_a^* = (5 \cdot 10^{-8} sm)^2 \sim 3 \cdot 10^{-15} sm^2.$$

əgər onların konsentrasiyası $N_a = 10^{16} sm^{-3}$ olsa,

$$l_a = \frac{1}{3 \cdot 10^{-15} \cdot 10^{16}} sm \sim 3 \cdot 10^{-2} sm.$$

Bu isə l üçün çox böyük qiymətdir, yeni bu cür nöqtəvi mərkəzlərdən səpilmə ehtimalı kiçikdir.

Dislokasiyaların uzunluğu adətən 1 mm tərtibində olur, en kəsiyinin diametri isə 100-ə qədər elementar özəyi əhatə edir. Ona görə belə mərkəzin en kəsiyi $S_D^* = (100 \cdot 5 \cdot 10^{-8} sm) = 5 \cdot 10^{-7} sm^2$ -dir. Dislokasiyaların həcm sıxlığını mümkün ola bilən qiymətlərin ən böyüyü tərtibində: $N_D = 10^8 sm^{-3}$ (bu, çox böyük sıxlıqdır və dislokasiyasının həcm sıxlığı bu qədər olan kristallar əksər hallarda praktiki məqsədlər üçün yarasız hesab olunur) götürsək, onda

$$l_D = \frac{1}{S_D^* N_D} = \frac{1}{5 \cdot 10^{-7} \cdot 10^8} sm = 2 \cdot 10^{-2} sm.$$

Deməli, bu halda da səpilmə ehtimalı kiçikdir.

Kristal sərhədlərindən və ayrı-ayrı kristalcıqların bitişmə sərhədindən səpilmə yalnız nazik lövhələrdə nəzərə çarpacaq dərəcədə ola bilər, nisbətən iri (ölçüləri 1 mm tərtibində olan) monokristallarda isə onların rolu yoxdur.

Yükdaşıyıcıların bir-birindən səpilməsi (qarşılıqlı təsiri) kiçik xarici sahələrdə nəzərə alınmayacaq dərəcədədir. Çünki bu qarşılıqlı təsir artıq öz-özü ilə əlaqələnen potensialda nəzərə alınmışdır və bunun nəticəsində də yükdaşıyıcılara qarşılıqlı təsirdə olmayan zərəciklər kimi baxırıq. Əlbət ki, onların qarşılıqlı təsiri elektrodinamikanın qanunları əsasında baş

verir, lakin qarşılıqlı təsirdə olan zərrəciklərin küllü miqdarda olması və onların dalğa xassəsinə malik olması nəticəsində real proseslər elə baş verir ki, sanki zərrəciklər arasında qarşılıqlı təsir yoxdur. Beləliklə dayanıqlı dinamik hal yaranır. Ona görə də yükdaşıyıcıların bir-birindən səpilməsi kinetik hadisələri təyin edə bilən əsas səpilmə növü ola bilməz (əlbəttə ki, zəif sahələrdə).

Qeyd etmək lazımdır ki, burada apardığımız hesablamaların dəqiqlik dərəcəsi çox aşağı olsa da, onlar ayrı-ayrı səpilmə mexanizmlərinin ümumi səpilməyə verdiyi pay haqda düzgün təsəvvür yaradır. Doğrudan da, təcrübə göstərir ki, 200-300 K-dən yuxarı temperaturlarda çox vaxt əsas rol istilik rəqslərindən səpilmə, daha aşağı temperaturlarda isə ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə oynayır. Bununla belə ayrı-ayrı səpilmə mexanizmlərinin rolu konkret təcrübə şəraitdən asılıdır və müəyyən şəraitdə üstünlük təşkil edən səpilmə mexanizmi başqa şəraitdə heç bir rol oynamaya bilər. Odur ki, biz hər bir səpilmə mexanizmini müfəssəl və kəmiyyətə araşdıracağıq.

§ 5.2. Relaksasiya müddətinin keçid ehtimalı və effektiv kəsiklə əlaqəsi

Kinetik effektləri araşdırarkən məlum olur ki, onların hamısı enerjiyə görə ortalaşdırılmış relaksasiya müddəti ilə təyin olunur. Relaksasiya müddəti isə toqquşma inteqralı vasitəsilə keçid ehtimalı ilə bağlıdır. Ona görə də relaksasiya müddəti və səpilmənin effektiv kəsiyi arasında birqiyəmətlilik asılılıq olmalıdır. Bunu aydınlaşdırmaqdan ötrü qərarlaşmış hal üçün aldığımız (4.2.6) ifadəsinə baxaq:

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_0)} W(\vec{k}, \vec{k}') \frac{f(\vec{k}') - f(\vec{k})}{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})} d\tau_v. \quad (5.2.1)$$

Paylanma funksiyasının (4.2.7) və (4.2.13) ifadəsindən istifadə edək:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_0)} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{f_0(\vec{k})}{f_0(\vec{k})} \right] d\tau_v = \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_0)} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{\frac{\partial f_0}{\partial E'}}{\frac{\partial f_0}{\partial E}} \frac{(\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}') \vec{k}')}{(\vec{\chi}(\vec{r}, \vec{k}) \vec{k})} \right] d\tau_v. \end{aligned} \quad (5.2.2)$$

$\vec{\chi}$ -nın (4.2.24) ifadəsindən göründüyü kimi, $0, \tau$ -dan mürəkkəb şəkildə asılıdır. Ona görə (5.2.2) ifadəsi ümumi halda τ -ya görə qeyri-xətti inteqral tənlikdir. Buradan da aydın olur ki, relaksasiya müddəti anlayışını daxil etmək, Boismann tənliyinin həllində meydana çıxan çətinliyi, ümumiyyətlə, aradan qaldırmır, ancaq onu f_0 -a görə həll etmək

məsələsindən τ -ya görə həll etmək məsələsinə keçirir. Buna baxmayaraq, (5.2.2) ifadəsi τ ilə effektiv kəsik arasında sadə əlaqə yaratmağa və beləliklə, məsələni həll etməyə imkan verir. Bunu göstərmək üçün çox zəif elektrik və maqnit sahələri halına baxaq və tutaq ki, $\vec{E} \rightarrow 0, \vec{B} \rightarrow 0$. Bu halda $\vec{\chi}$ -nin ifadəsində maqnit sahəsinin təsiri ilə yaranan hədlər elektrik sahəsinin yaratdığı hədlərə nisbətən çox-çox kiçikdir və onları nəzərə almaya bilərik. Onda:

$$\vec{\chi} = \tau(\vec{k}) \left[e\vec{E} - \nabla F - (E - F) \frac{\nabla T}{T} \right], \quad (5.2.3)$$

$$\vec{\chi}' = \tau(\vec{k}') \left[e\vec{E} - \nabla F - (E' - F) \frac{\nabla T}{T} \right]. \quad (5.2.3 a)$$

Elastiki səpilmə zamanı enerjinin dəyişməsi cüzi olduğu üçün $E = E', \frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{\partial f_0}{\partial E'}, k = k'(v = v')$ və izoenergetik səthlər sferik olduqda $\tau \vec{k}$ vektorunun istiqamətində asılı deyil: $\tau(\vec{k}) = \tau(\vec{k}')$. Onda $\vec{\chi}' = \vec{\chi}$ və (5.2.2)-dən:

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_B)} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{(\vec{\chi} \vec{k}')}{(\vec{\chi} \vec{k})} \right] d\tau_{k'}. \quad (5.2.4)$$

Xarici sahələri elə seçə bilərik ki, $\vec{\chi}$ -nin istiqaməti yükdaşıyıcıların istiqamətlənmiş hərəkəti ilə eyni olsun, yeni $\vec{\chi} \parallel \vec{k}$ (bunu (5.2.3)-dən aydın görmək olur: əgər $\nabla T = \nabla F = 0$ olsa, $\vec{\chi} \parallel \vec{E}$ olur). Onda $(\vec{\chi} \vec{k}') = \chi k' \cos \theta, (\vec{\chi} \vec{k}) = \chi k$, burada θ -səpilmə bucağıdır (\vec{k}' və \vec{k} vektorları arasında qalan bucaqdır). Bunları (5.2.4)-də yerinə yazaq:

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_B)} W(\vec{k}, \vec{k}') (1 - \cos \theta) d\tau_{k'}. \quad (5.2.5)$$

Sferik koordinatlardan istifadə etsək, istiqamətdən asılılığı θ və φ vasitəsilə göstərə bilərik:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(k, k', \theta, \varphi).$$

Digər tərəfdən, izoenergetik səthlər sfera olduğu üçün həcm elementi $d\tau_{k'}$ -i (4.3.8) və (4.3.9) düsturları vasitəsilə ifadə edə bilərik:

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_B)} W(k, k', \theta, \varphi) (1 - \cos \theta) k'^2 dk' d\Omega, \quad (5.2.6)$$

burada $W(k, k', \theta, \varphi)$ -yə mürəkkəb hadisənin ehtimalı kimi baxa bilərik: 1) bir zərrəciyin səpilərək (θ, φ) istiqamətində vahid cisim bucağına düşməsi (hərəkət istiqamətinin dəyişməsi); 2) həmin zərrəciyin səpilmə nəticəsində \vec{k} dalğa vektoru ilə xarakterizə olunan vahid həcmdən \vec{k}' -lə xarakterizə olunan vahid həcmə keçməsi (enerjinin dəyişməsi). Bu

hadisələr asılı olmadıqları üçün onların eyni zamanda başvermə ehtimalı, ayrı-ayrı hadisələrin ehtimalları hasilinə bərabərdir:

$$W(k, k', \theta, \varphi) = W_1(\theta, \varphi) \cdot W_2(k, k'). \quad (5.2.7)$$

W_1 -i diferensial effektiv kəsik vasitəsi ilə ifadə edə bilərik. Vahid zərrəcikli seldə vahid zamanda vahid en kəsiyindən $1 \cdot \nu(\bar{k})$ zərrəcik keçir. Səpici mərkəzlərin konsentrasiyası N olsa:

$$W_1(\theta, \varphi) = 1 \cdot \nu(\bar{k}) N \sigma(\theta, \varphi). \quad (5.2.8)$$

Zərrəciyin (θ, φ) istiqamətində vahid cisim bucağına söykənən səthdən 1 san-də \bar{k} ilə təyin olunan vahid həcmdən qalınlığı $dk' = 1$ olub, \bar{k}' -lə təyin olunan kürə qatının həcminə düşmə ehtimalını $W_2(k, k')$ -lə işarə edək. Bu zaman zərrəcik k'^2 -na bərabər səthdən (vahid cisim bucağına söykəndiyi üçün) qalınlığı $dk' = 1$ olan laya keçir. Bu layın həcmi $k'^2 \cdot 1$ -dir. Onda vahid həcmə düşmə ehtimalı:

$$\frac{W_2'(k, k')}{k'^2 \cdot 1} = W_2(k, k').$$

Deməli:

$$W(k, k', \theta, \varphi) = \nu(\bar{k}) N \sigma(\theta, \varphi) \frac{W_2'(k, k')}{k'^2}. \quad (5.2.9)$$

Bu ifadəni (5.2.6)-də yerinə yazaq:

$$\frac{1}{\tau} = \int_{(4\pi)} \nu(\bar{k}) N \sigma(\theta, \varphi) (1 - \cos \theta) d\Omega \cdot \frac{1}{4\pi^3} \int_0^\infty W_2'(k, k') dk'. \quad (5.2.10)$$

Səpilmə elastiki olduğu üçün səpilmədən sonra zərrəcik elə əvvəlki izoenergetik səthdə qalır. Ona görə $W_2(k, k')$ ehtimalı delta funksiya ilə mütənasib olmalıdır:

$$W_2'(k, k') = C \delta(k - k'). \quad (5.2.11)$$

C mütənasiblik əmsalı normalama şərtindən təyin olunur:

$$\frac{1}{4\pi^3} C \int_0^\infty \delta(k - k') = 1. \quad (5.2.12)$$

Bu ifadə (normalama şərti), zərrəciyin səpildəndən sonra k' -in bütün mümkün olan qiymətləri ilə təyin olunan izoenergetik səthlərdən birinə keçməsi ehtimalıdır. Bu hadisə labüd olduğu üçün ehtimalı vahiddir. (5.2.12) və (5.2.11)-ü (5.2.10)-də nəzərə alsaq:

$$\frac{1}{\tau} = \nu(\bar{k}) N \int_{(4\pi)} \sigma(\theta, \varphi) (1 - \cos \theta) d\Omega = \nu(\bar{k}) N \sigma_c. \quad (5.2.13)$$

Buradan:

$$\tau = \frac{1}{\nu(\bar{k}) N \sigma_c}. \quad (5.2.14)$$

Deməli, relaksasiya müddəti transport effektiv kəsiyi ilə (σ_c) təyin olunur. Biz köçürmə hadisələrini öyrənərkən (5.1.7) düsturundan deyil, səpilmədə bucağa görə ortalaşdırmanı nəzərə alan (5.2.14) düsturundan istifadə edəcəyik. Buradan sərbəst yol üçün:

$$l(\vec{k}) = \tau(\vec{k})v(\vec{k}) = \frac{1}{N\sigma_c}. \quad (5.2.15)$$

alınır.

§ 5.3. Kvant keçidləri haqda bəzi məlumat.

Kinetik tənliyin tətbiq olunma hüdudu

Yuxarıda qeyd etdik ki, ideal qüsursuz kristal qəfəsində yükdaşıyıcılar səpilmir. Lakin real kristallarda səpilməni nəzərə almamaq olmaz. Elektron qüsurlu kristal qəfəsində hərəkət etdikdə sistemin Hamilton operatoru:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (5.3.1)$$

burada \hat{H}_0 - ideal qüsursuz kristal qəfəsinə uyğun gələn Hamilton operatoru, \hat{H}' isə elektronun səpici mərkəzlə qarşılıqlı təsir Hamilton operatorudur. Elektronun səpici mərkəzlə qarşılıqlı təsir enerjisi əksər hallarda nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçikdir. Ona görə də səpici mərkəzin rolu əsasən elektronun kvazi-impulsunu dəyişdirməkdən ibarət olur. Aydındır ki, belə olduqda elektronun real kristalda səpilməsinə biz kvant mexanikasının adi məsələlərindən biri kimi $-\hat{H}'$ həyəcanlaşdırıcı təsir nəticəsində sistemin iki halı arasında baş verə bilən keçid ehtimalının hesablanması məsələsi kimi baxa bilərik. Burada həyəcanlaşmamış sistem və ya əsas hal rolunu «elektron plus ideal kristal qəfəsi» oynayır.

Həyəcanlaşmamış sistemin müxtəlif hallarını təsvir edən kvant ədədlərini λ ilə, uyğun dalğa funksiyalarını ψ_λ və enerjinin məxsusi qiymətlərini E_λ ilə işarə edək. Onda kvant mexanikasından məlum olduğu kimi, vahid zamanda elektronun λ halından λ' halına keçid ehtimalı belə təyin olunur:

$$W(\lambda, \lambda') = \frac{2}{\hbar} \cdot \frac{\sin\left(\frac{E_{\lambda'} - E_\lambda t}{\hbar}\right)}{E_{\lambda'} - E_\lambda} \left| \langle \lambda' | \hat{H}' | \lambda \rangle \right|^2. \quad (5.3.2)$$

Burada:

$$\langle \lambda' | \hat{H}' | \lambda \rangle = \int \psi_{\lambda'}^* \hat{H}' \psi_\lambda d\tau \quad (5.3.3)$$

keçidi xarakterizə edən matris elementidir.

Hələlik (5.3.2)-i kinetik tənlikdə ifadə etmək olmaz. Çünki o, diskret spektrdəki hallar arasında baş verən keçidləri təsvir edir. Kinetik tənlik isə kəsilməz spektrə malik olan sistemlər üçün doğrudur, ancaq diskret spektrdən kəsilməz spektrə keçmək heç bir çətinlik törətmir. Bunun üçün yada salaq ki, biz əslində həmişə ölçüləri kifayət qədər böyük olan makroskopik sistemə baxırıq. Bu isə (5.3.2) ifadəsini böyük t -lərdə sadələşdirməyə imkan verir. Bu halda zamanın $t \rightarrow \infty$

qiymətlərində $\frac{\sin\left(\frac{E_x - E_\lambda t}{\hbar}\right)}{E_x - E_\lambda}$ asimptotik olaraq δ -funksiyaya çevrilir:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin\left(\frac{E_x - E_\lambda t}{\hbar}\right)}{\frac{E_x - E_\lambda}{\hbar}} \cdot \hbar = \frac{\pi}{\hbar} \delta\left(\frac{E_x - E_\lambda}{\hbar}\right) = \pi \delta(E_x - E_\lambda). \quad (5.3.4)$$

Bunu nəzərə alsaq:

$$W(\lambda, \lambda') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \lambda' | \hat{H} | \lambda \rangle|^2 \delta(E_x - E_\lambda). \quad (5.3.5)$$

Bu ifadə göstərir ki, vahid zaman üçün hesablanmış keçid ehtimalı həyəcanlanmanın yaratdığı uyğun matris elementi ilə mütənasibdir və o halda sıfırdan fərqlidir ki, $E_x = E_\lambda$ olsun, yəni sistemin enerjisi saxlanılsın.

Bir cəhəti xüsusi qeyd edək. Biz axırncı ifadəni alarkən $t \rightarrow \infty$ limit qiymətindən istifadə etdik, lakin həqiqətdə (5.3.2) və (5.3.5) ifadələri sonlu zaman intervalı üçün doğrudur. Belə ki, birinci yaxınlaşmada həyəcanlaşma nəzəriyyəsi təkrar səpilmə aktlarını nəzərə almır. Əslində isə təkrar səpilmələr mövcuddur və onlar iki ardıcıl toqquşma arasındakı məsafəni (sərbəst yolun uzunluğunu) getmək üçün sərf olunan müddətdən (τ) sonra baş verir. Onda aydındır ki, birinci səpilmə aktında qarşılıqlı təsir müddəti τ -dan çox-çox kiçik olmalıdır, yəni:

$$t \ll \tau. \quad (5.3.6)$$

(5.3.6) şərti yalnız həyəcanlanma nəzəriyyəsinin tətbiqi ilə əlaqədar deyil, o həm də kinetik tənliyin doğru olduğu hüdudu göstərir. Buna bir qədər sonra baxacağıq. İndi $t \rightarrow \infty$ keçidinin mənasını aydınlaşdıraraq. Bu, fiziki olaraq o deməkdir ki, t -nin qiyməti toqquşmanın dinamikasını təyin edən müəyyən bir xarakterik zaman intervalından nəzərə çarpacaq dərəcədə böyük olmalıdır. Bu xarakterik müddəti nədən ibarət olduğunu aydınlaşdırmaq üçün (5.3.2) ifadəsində sinusun arqumentini belə yazacaq:

$$\frac{E_x - E_\lambda}{\hbar} \cdot \frac{\bar{E}}{\hbar} t, \quad (5.3.7)$$

burada \bar{E} - enerjinin orta qiymətidir. $\frac{\bar{E}}{\hbar} t \gg 1$ olduqda bu arqument ümumiyyətlə çox böyük qiymətə malik olur və onun sinusu, eləcə də (5.3.2) ifadəsinin sağ tərəfi $E_{x'}$ -dən asılı olaraq böyük sürətlə ossilyasiya edir. Ona görə də onun kinetik tənlikdəki toqquşma inteqralında yaratdığı pay çox kiçik olur. Burada müstəsnaqlıq təşkil edən (5.3.7)-də birinci vuruğun kifayət qədər kiçik qiymətlərə malik olduğu haldır:

$$\frac{|E_{x'} - E_x|}{\bar{E}} \ll \frac{\hbar}{\bar{E}t}. \quad (5.3.8)$$

Bu da $t \rightarrow \infty$ olduqda enerjinin saxlanma qanununu δ - funksiya vasitəsilə ödəyir. Beləliklə, $t \rightarrow \infty$ əslində belə şərtə ekvivalentdir:

$$t \gg \frac{\hbar}{\bar{E}}, \text{ yaxud } t \gg \frac{\hbar}{E}. \quad (5.3.9)$$

Digər tərəfdən, axırncı bərabərsizlik (5.3.6) şərtinə zidd olmamalıdır. Onda relaksasiya müddəti

$$\tau \gg \frac{\hbar}{\bar{E}}, \text{ yaxud } \tau \gg \frac{\hbar}{k_0 T}. \quad (5.3.10)$$

Burada biz cırılma olmayan hal üçün $\bar{E} \sim k_0 T$ yazdıq. Tam cırılmış elektron qazı üçün isə:

$$\tau \gg \frac{\hbar}{F}. \quad (5.3.11)$$

Tam cırılmış deşik qazı üçün axırncı ifadədə F -in yerinə $-\Delta E_g - F$ -yazmaq lazımdır. Buradan aydın olur ki, (5.3.10) və (5.3.11) şərtləri kinetik tənliyin tətbiq olunma hüdudunu müəyyən edir. Hər hansı bir mexanizm üçün relaksasiya müddətini hesabladıqdan sonra biz yuxarıdakı şərtlərin ödənilməsini yoxlamalıyıq. Yalnız bu şərtlər ödənildikdən sonra alınan nəticəni kinetik tənlikdə istifadə etmək olar. Əks halda məsələnin qoyuluşunu tamamilə dəyişmək lazımdır. Çünki artıq sistemin enerji spektrini hesablayarkən yükdaşıyıcının səpici mərkəzlə qarşılıqlı təsir enerjisini nəzərə almamaq olmaz.

Kinetik tənliyin tətbiq olunma hüdudunu Heyzenberqin qeyri-müəyyənlik prinsipindən də almaq olar. Bu prinsipə görə keçiricilik elektronunun enerjisi $\Delta \varepsilon \geq \frac{\hbar}{\Delta t}$ dəqiqliyi ilə təyin oluna bilər. Burada Δt elektronun kvazi-qərarlaşmış hala gəlməsi üçün lazım olan müddətdir ki, bu da relaksasiya müddəti $\langle \tau \rangle$ tərtibindədir. Digər tərəfdən, kinetik tənliyin doğru olması üçün elektronun enerjisindəki qeyri-müəyyənlik $k_0 T$ enerji intervalının qiymətindən çox-çox kiçik olmalıdır, çünki kinetik

tənlikdə iştirak edən $f(k)$ paylanma funksiyası məhz bu intervalda ciddi dəyişikliyə uğrayır. Onda:

$$\frac{2\pi\hbar}{\tau} \leq \Delta\varepsilon \ll k_0 T. \quad (5.3.12)$$

Buradan da (5.3.10) və ya (5.3.11) şərtini alırıq.

(5.3.10) şərtini daha başqa cür ifadə edə bilərik. Elektronun orta kinetik enerjisi $k_0 T$ tərtibindədir, yəni $m^* \bar{v}^2 \approx k_0 T$ (\bar{v} - elektronun orta sürətidir). Buna uyğun de-Broyl dalğasının uzunluğu $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m\bar{v}}$, sərbəst yolun uzunluğu isə $l = \bar{v}\tau$. Bunlardan (5.3.10)-də istifadə etsək, alırıq:

$$l \gg \lambda. \quad (5.3.13)$$

Qeyd edək ki, sərbəst yolun uzunluğu böyük olduqca yükdaşıyıcının səpici mərkəzlə qarşılıqlı təsiri zəif olur və de-Broyl dalğasının uzunluğu kiçik olduqca zərəcəyin sürəti (və ya enerjisi) böyük olur.

Yürüklüyün relaksasiya müddəti ilə $\mu = \frac{e}{m} \langle \tau \rangle$ əlaqəsindən istifadə edib, (5.3.10) şərtini daha əyani parametrlə təcrübədə tapılması asan olan yürüklüklə ifadə edək:

$$\mu \gg \frac{2\pi\hbar}{m^* k_0 T}. \quad (5.3.14)$$

Əgər $m^* = m_0 = 9,1 \cdot 10^{-28} q$, $T = 300K$ götürsək, buradan otaq temperaturu üçün alırıq:

$$\mu \gg 40 \frac{sm^2}{V \cdot san} \quad (5.3.15)$$

Deməli, əgər otaq temperaturunda yürüklüyü $40 \frac{sm^2}{V \cdot san}$ -dən kiçikdirsə, onda bu hal üçün kinetik tənlik yararlı deyil.

Kinetik tənliyin tətbiq olunmasını məhdudlaşdıran ikinci səbəb xarici sahənin qiyməti ilə əlaqədardır. Xarici sahə istənilən qədər böyük götürülə bilməz, elə olmalıdır ki, onun təsiri ilə yükdaşıyıcıların enerji spektri dəyişməsin. Bu isə adətən çox güclü olmayan sahələrdə mümkündür. Biz sonrakı bəhslərdə zəif və güclü elektrik və maqnit sahələri anlayışını müfəssəl müzakirə edəcəyik, lakin burada onu qeyd etməklə kifayətlənək ki, maqnit sahəsinin müəyyən (böyük) qiymətlərindən sonra maqnit sahəsinə perpendikulyar olan müstəvidə yükdaşıyıcıların enerjisi kvantlanır və artıq enerji səviyyələrinin diskretliyini nəzərə almamaq olmaz. Belə sahə kvantlayıcı maqnit sahəsi adlanır. Kvantlayıcı maqnit sahəsində elektronun (və ya deşiyin) hərəkəti enerji, impuls və koordinatın kəsilməz qiymətləri ilə təsvir oluna bilməz. Ona görə də bu hal üçün kinetik tənlik yararlı deyil.

§ 5.4. İonlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə

Tutaq ki, konsentrasiyası N_1 olan ionlaşmış aşqar mərkəzləri kristalın həcmində müntəzəm paylanmışdır. Yükdaşıyıcılar bu mərkəzlərin hər biri ilə rastlaşdıqda Kulon qarşılıqlı təsiri nəticəsində öz hərəkət istiqamətini dəyişəcəklər (səpiləcəklər). Bu, 5.5.-ci şəkildə sxematik göstərilmişdir.

Diferensial effektiv kəsiyi hesablamq üçün həyəcanlaşdırıcı sahənin (mərkəzin) $V(r)$ potensialını bilməliyik. Kristalda yalnız bir dənə ionlaşmış aşqar mərkəzi (atomu) olsa idi, onun potensialı:

$$V(r) = \pm \frac{ze^2}{\epsilon r}, \quad (5.4.1)$$

burada ze^- ionun yükü (z - ionlaşma tertibi), r - ion mərkəzindən yükdaşıyıcıya qədər olan məsafə, ϵ - yarımkəçiricinin dielektrik sabitidir. Müsbət işarəsi ionla yükdaşıyıcının eyni adlı yükə malik olduğu halda, mənfi işarəsi isə - əks adlı olduğu hala aiddir. Aydındır ki, kristalda ionlaşmış mərkəzlərin sayı çox olduğu üçün onlar bir-birinin sahəsinin təsir sferasını məhdudlaşdırır (ekranlaşdırır). Bunu, bir qədər sonra görəcəyik ki, potensialı belə seçməklə nəzərə ala bilərik:

$$V(r) = \pm \frac{ze^2}{\epsilon r} e^{-qr}, \quad (5.4.2)$$

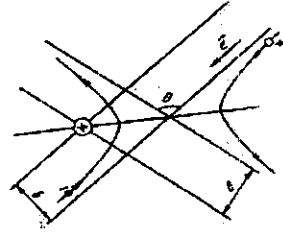
burada q - parametri ionun elektrik sahəsinin təsir radiusunu müəyyən edir. Doğrudan da $r = \frac{1}{q} = R_0$ olduqda sahə e dəfə azalmış olur. $q = 0$ olsa,

(5.4.2) (5.4.1)-ə çevrilir.

Kvant mexanikasından məlumdur ki, potensialı sferik simmetriyaya malik olan mərkəzdən elektronun səpilməsi zamanı diferensial effektiv kəsik belə düsturla ifadə olunur:

$$\sigma(\theta, \varphi) = \left| \frac{2m^*}{h^2} \int_0^\infty r V(r) \frac{\sin(|\vec{k}' - \vec{k}|r)}{|\vec{k}' - \vec{k}|} dr \right|^2. \quad (5.4.3)$$

Burada $\vec{x} = \vec{k}' - \vec{k}$ ilə əvəz edək və $V(r)$ -in (5.4.2) ilə ifadə olunduğunu nəzərə almaqla inteqralı açaq:



Şəkil 5.5. Yükdaşıyıcıların ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilməsi

$$\begin{aligned}\sigma(\theta, \varphi) &= \frac{4m^{*2}}{\hbar^4} \left| \int_0^{\infty} r \left(\pm \frac{ze^2}{\epsilon r} e^{-qr} \right) \frac{\sin \chi r}{\chi} dr \right|^2 = \\ &= \left(\frac{m^* ze^2}{\hbar^2 \epsilon} \right)^2 \frac{1}{\chi^2} \left| \int_0^{\infty} \frac{4}{i} (e^{-qr+i\chi r} - e^{-qr-i\chi r}) dr \right|^2.\end{aligned}\quad (5.4.4)$$

Bu ifadəni alarkən sinusun əvəzinə $\sin \chi r = \frac{e^{i\chi r} - e^{-i\chi r}}{2i}$ yazdıq. İnteqralı J_x ilə işarə edək və ayrıca hesablayaq:

$$\begin{aligned}J_x &= \left(\frac{1}{-q+i\chi} e^{-qr+i\chi r} + \frac{1}{q+i\chi} e^{-qr-i\chi r} \right) \Big|_0^{\infty} = \frac{1}{q^2 + \chi^2} \times \\ &\times \{ e^{-qr} [(-q-i\chi)(\cos \chi r + i \sin \chi r) + (q-i\chi)(\cos \chi r - i \sin \chi r)] \} \Big|_0^{\infty} = \\ &= \frac{2i}{q^2 + \chi^2} \cdot \frac{k \cos \chi r - q \sin \chi r}{e^{qr}} \Big|_0^{\infty} = \frac{2i\chi}{q^2 + \chi^2}.\end{aligned}\quad (5.4.5)$$

Alınan nəticəni (5.4.4)-da yerinə yazsaq:

$$\sigma(\theta, \varphi) = \sigma(\theta) = 4 \left(\frac{m^* ze^2}{\hbar^2 \epsilon} \right)^2 \cdot \frac{1}{(q^2 + \chi^2)^2}.\quad (5.4.6)$$

Deməli, bu halda diferensial effektiv kəsik φ bucağından asılı deyil. χ -ni dalğa vektoru və səpilmə bucağı vasitəsi ilə ifadə etsək, asanlıqla görürük. Səpilmə elastik olduğu üçün

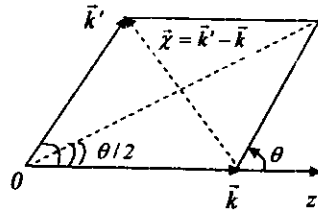
$$E' = E, \quad |\vec{k}'| = |\vec{k}|.\quad (5.4.7)$$

5.6-cı şəkildə səpilmə mərkəzini koordinat başlanğıcı götürməklə \vec{k} və \vec{k}' vektorları üzərində paraleloqram qurulmuşdur. Burada $\vec{\chi} = \vec{k}' - \vec{k}$ göstərilmişdir.

Tərəfləri bir-birinə bərabər olduğu üçün bu paraleloqram rombdur (rombun diaqonalları bir-birinə perpendikulyardır). Şəkildən aydın olur ki,

$$\chi = 2k \sin \frac{\theta}{2},\quad (5.4.8)$$

bu ifadəni (5.4.6)-də yerinə yazsaq:



Şəkil 5.6. $\vec{\chi}$ ilə səpilmə bucağı θ arasında əlaqə

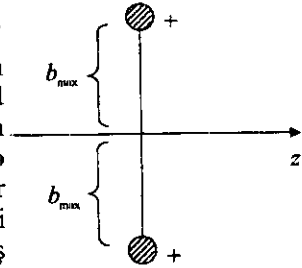
$$\sigma(\theta) = 4 \left(\frac{m^* ze^2}{\hbar^2 \epsilon} \right)^2 \frac{1}{\left(q^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^2},\quad (5.4.9)$$

burada $q=0$ götürsək, kristalda yalnız bir ion mərkəzi olan hal üçün (ekranlaşma yoxdur) səpilmənin diferensial effektiv kəsiyini almış olarıq:

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4} \left(\frac{ze}{\epsilon m^* v^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (5.4.10)$$

Bu ifadədə k -nın yerinə $k = \frac{m^* v}{\hbar}$ yazdıq.

Aldığımız bu ifadə α - zərrəciklərinin nüvədən səpilməsini təsvir edən məşhur Rezerford düsturu ilə eynidir. Diferensial effektiv kəsiyin (5.4.10) ifadəsindən istifadə edib, inteqral və transport effektiv kəsiyi hesablasaq, onların hər ikisi üçün sonsuzluq alırıq. Bunun da fiziki mənası əlbət ki, aydındır. Kristalda yerləşmiş yeganə ion mərkəzinin elektrik sahəsi sonsuzluğa qədər yayılır. Ona görə də fəzanın istənilən nöqtəsində yükdaşıyıcı bu sahə ilə qarşılıqlı təsirdə olacaq. Bu işə inteqral (eləcə də transport) effektiv kəsiyin sonsuz böyük olması deməkdir. Lakin, yuxarıda qeyd etdiyimiz kimi, kristalda olan çoxlu miqdarda ionlaşmış aşqar mərkəzləri bir-birinin sahəsini ekranlayır və bunu nəzərə almamaq olmaz. Kiçik səpilmə bucaqlarına böyük hədəf məsafəsi (b) uyğun gəlir və ekranlaşma mövcud olduqda hədəf məsafəsini sonsuz böyük götürmək düzgün deyil, b yuxarıdan məhdud olmalıdır. Əks halda effektiv kəsik üçün həqiqətə uyğun gəlməyən sonsuz böyük qiymət alınır. Hədəf məsafəsinin ən böyük qiyməti (b_{\max}) iki qonşu ion mərkəzi arasındakı məsafənin yarısına bərabərdir, (şəkil 5.7). İonlaşmış aşqar mərkəzinin konsentrasiyası N_1 -dirsə, onda iki qonşu mərkəz arasındakı məsafə $\frac{1}{\sqrt[3]{N_1}}$ -



Şəkil 5.7. Hədəf məsafəsinin qiymətləndirilməsi

dir. Deməli, $b_{\max} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt[3]{N_1}} \cdot b_{\max}$ -a səpilmə bucağının minimumu uyğun gəlir (θ_{\min}). θ_{\min} -u α - zərrəciklərinin nüvədən səpilməsi nəzəriyyəsiindən istifadə edib, tapa bilərik:

$$\operatorname{tg} \frac{\theta_{\min}}{2} = \frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} \cdot \frac{1}{b_{\max}} = \frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} 2N_1^{\frac{1}{3}}. \quad (5.4.11)$$

Artıq inteqral effektiv kəsiyi (5.4.10) ifadəsindən istifadə etməklə hesablaya bilərik. Bunun üçün θ -ya görə inteqrallamanı θ_{\min} -dan π -yə qədər aparmalıyıq:

$$\begin{aligned}
s^* &= 2\pi \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \sigma(\theta) \sin \theta d\theta = \frac{\pi}{2} \left(\frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} \right)^2 \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = \\
&= \frac{\pi}{2} \left(\frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} \right)^2 \cdot \left(-\frac{2}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \right) \Big|_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} = \pi \left(\frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \frac{\theta_{\min}}{2}} - 1 \right). \quad (5.4.12)
\end{aligned}$$

İntegralı açarkən $\sin \theta = 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$ düsturundan istifadə etdik. (5.4.12)-ü daha da sadələşdirmək üçün məlum münasibətdən istifadə edək:

$$\frac{1}{\sin^2 \alpha} = 1 + \frac{1}{\operatorname{tg}^2 \alpha}. \quad (5.4.13)$$

(5.4.12)-də (5.4.11) və (5.4.13)-i nəzərə alsaq:

$$s^* = \pi \left(\frac{1}{2N_1^3} \right)^2 = \pi b_{\max}^2. \quad (5.4.14)$$

Deməli, ionlaşmış aşqar mərkəzinin inteqral effektiv kəsiyi ədədi qiymətə radiusu maksimum hədəf məsafəsi olan dairənin sahəsinə bərabərdir. (5.4.14)-dən görüldüyü kimi, inteqral effektiv kəsik yükdaşıyıcının sürətindən (və ya enerjisindən) və temperaturdan asılı deyil. Yalnız ionlaşmış aşqar mərkəzlərinin konsentrasiyasından asılıdır. Bu da aydındır. Konsentrasiya çox olduqca qonşu mərkəzlər arasındakı məsafə kiçilir və onlar bir-birinin sahəsinə daha çox ekranlaşdırır və əksinə. Diferensial effektiv kəsik isə yükdaşıyıcının sürətindən (və deməli enerjisindən) kəskin asılıdır:

$$\left[\sigma(\theta) \sim \frac{1}{v^4} \right].$$

Özü də səpilmə güclü anizotropiyaya malikdir, $\sigma(\theta)$ səpilmə bucağının sinusunun dördüncü dərəcəsi ilə tərs mütənasibdir:

$$\sigma(\theta) \sim \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (5.4.15)$$

Ona görə də səpilməni daha düzgün xarakterizə etmək üçün transport effektiv kəsiyini σ_c hesablamaq lazımdır.

$$\sigma_c = 2\pi \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta = 2\pi \cdot \frac{1}{4} \left(\frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} \right)^2 \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} =$$

$$= \frac{\pi}{2} \left(\frac{ze'}{\epsilon m^* v'} \right)^2 \int_{\theta_{\min}}^{\pi} \frac{2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cdot 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = -4\pi \left(\frac{ze'}{\epsilon m^* v'} \right)^2 \ln \sin \frac{\theta_{\min}}{2}. \quad (5.4.16)$$

Burada kiçik bir dəyişiklik aparaq:

$$-2 \ln \sin \frac{\theta_{\min}}{2} = \ln \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta_{\min}}{2}} = \ln \left(1 + \frac{1}{\operatorname{tg}^2 \frac{\theta_{\min}}{2}} \right) \quad (5.4.17)$$

(5.4.17) və (5.4.14)-ü (5.4.16)-da nəzərə alsaq:

$$\sigma_c = 2\pi \left(\frac{ze^2}{\epsilon m^* v^2} \right)^2 \ln \left[1 + \frac{1}{4N_1^3} \left(\frac{\epsilon m^* v^2}{ze^2} \right)^2 \right], \quad (5.4.18)$$

burada σ_c yükdaşıyıcının sürətindən mürəkkəb şəkildə asılıdır, lakin loqarifm vuruğu zəif asılılıq verdiyi üçün kiçik xəta ilə deyə bilərik ki, $\sigma_c \sim \frac{1}{v^4}$.

Artıq relaksasiya müddətini tapa bilərik:

$$\tau = \frac{1}{N_1 \sigma_c v} = \frac{\epsilon^2 m^{*2} v^3}{2\pi^2 e^4 N_1 \ln \left[1 + \frac{1}{4N_1^3} \left(\frac{\epsilon m^* v^2}{ze^2} \right)^2 \right]}, \quad (5.4.19)$$

burada sürətlə enerjinin $v = \left(\frac{2E}{m^*} \right)^{\frac{1}{2}}$ əlaqəsini nəzərə alsaq:

$$\tau = \frac{\sqrt{2} \epsilon^2 m^{*2} \frac{1}{2}}{\pi^2 e^4 N_1} \cdot \frac{E^{\frac{3}{2}}}{\ln \left[1 + \left(\frac{\epsilon E}{N_1^{\frac{1}{3}} ze^2} \right)^2 \right]} = \tau_{01} E^{\frac{3}{2}}. \quad (5.4.20)$$

Burada loqarifmik ifadə enerjiden zəif asılı olduğu üçün onu sabit qəbul edə bilərik. Ona görə də sabit vuruqları loqarifmlə birlikdə τ_{01} ilə işarə etdik:

$$\tau = \frac{\sqrt{2} \epsilon^2 m^{*2} \frac{1}{2}}{\pi^2 e^4 N_1} \cdot \frac{1}{\ln \left[1 + \left(\frac{\epsilon E}{N_1^{\frac{1}{3}} ze^2} \right)^2 \right]}. \quad (5.4.21)$$

Deməli, ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə zamanı relaksasiya müddəti enerjiden $\tau \sim E^{\frac{3}{2}}$ kimi asılıdır. (5.4.20) ifadəsi τ üçün **Konvell-Vayskopf düsturu adlanır.**

σ_c effektiv kəsiyi ilə əlaqədar olan bir cəhətə də diqqət yetirək.

Əgər $y = \frac{1}{4N_1^{\frac{2}{3}}} \left(\frac{\varepsilon m^* v^2}{ze^2} \right)^2$ işarə etsək, onda $\sigma_c = \frac{\pi}{2N_1^{\frac{2}{3}}} \frac{\ln(1+y)}{y}$ olar. y -i

yükdaşıyıcının enerjisi ilə əlaqələndirə bilərik:

$$y = \left(\frac{\frac{m^* v^2}{2}}{\frac{ze^2}{\varepsilon 2b_{\max}}} \right) = \left(\frac{E}{V(2b_{\max})} \right)^2,$$

burada E - elektronun kinetik enerjisi, $V(2b_{\max})$ isə onun ionlaşmış aşqar mərkəzinin elektrik sahəsində $r = 2b_{\max}$ məsafədə (əlbət ki, başqa ionlar olmasa) potensial enerjisidir (işarəni nəzərə almırıq). $y \gg 1$ olduqda $\sigma_c \sim \frac{\ln y}{y}$, yəni $\sigma_c \sim \frac{1}{v^4}$. Bu hal böyük sürətli elektronlar üçün doğrudur.

$y \ll 1$ olsa, $\ln y \approx y$ və $\sigma_c = \text{const}$. Bu isə kiçik sürətli elektronlar üçün doğrudur. Yəni $E \ll V(2b_{\max})$ olduqda, səpilmənin σ_c effektiv kəsiyi elektronun sürətindən asılı deyil.

Yükdaşıyıcıların ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilməsini α -zərrəciklərinin səpilməsi nəzəriyyəsinə əsaslanaraq araşdıraq. Ekranlaşma radiusunu maksimum hədəf məsafəsinə bərabər götürdük. Məsələnin digər yolla həlli ion mərkəzlərinin Kulon sahəsinin ekranlaşmasını başqa cür (sərbəst yükdaşıyıcıların təsiri ilə) nəzərə alır. Yüklü mərkəzlərin elektrik sahəsi hər bir mərkəzin ətrafında sərbəst yükdaşıyıcıların orta konsentrasiyasının dəyişməsinə səbəb olur. Tutaq ki, yükdaşıyıcıların müntəzəm paylanmaya uyğun gələn orta konsentrasiyası n , ionlaşmış mərkəzdən hər hansı r məsafədə dəyişən konsentrasiyası isə n' -dir. (n' r -dən asılıdır, çox böyük r -lərdə $n' = n$ -dir). Müəyyənlik üçün yükdaşıyıcının elektron və səpici mərkəzin birqat müsbət yüklü ($+e$) aşqar atomu olduğunu qəbul edək. Koordinat başlanğıcında olan $+e$ yükünün və onun ətrafında artıqlıq təşkil edən $-e(n' - n)$ mənfi yükünün yaratdığı elektrik sahəsinin potensialını φ ilə işarə edək. Bu halda Puasson tənliyi belə olar:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{4\pi e}{\varepsilon} (n' - n). \quad (5.4.22)$$

Koordinat başlangıcında müsbət (+e) nöqtəvi yük yerləşdiyi üçün sərhəd şərti:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \varphi = \frac{e}{\epsilon r}. \quad (5.4.23)$$

III fəsildən məlumdur ki,

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c F_{\frac{1}{2}}(\eta), \quad N_c = 2 \left(\frac{2\pi m^* k_0 T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (5.4.24)$$

burada $F_{\frac{1}{2}}$ - Fermi inteqralı, k_0 - Bolsman sabiti, $\eta = \frac{F}{k_0 T}$ - gətirilmiş kimyəvi potensialdır. Əgər φ müntəzəm dəyişirsə, onda elektronun ($-e\varphi$) potensial enerjisi tarazlıq paylanma funksiyasında onun $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ enerjisinə əlavə olunur:

$$f_0 = \frac{1}{e \frac{E - e\varphi - F}{k_0 T} + 1}. \quad (5.4.25)$$

Bu isə o deməkdir ki, n' -i tapmaq üçün n -in ifadəsində F -i $F + e\varphi$ ilə əvəz etmək kifayətdir. $\frac{e\varphi}{k_0 T} = u$ ilə əvəz etsək onda n' üçün alırıq:

$$n' = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c F_{\frac{1}{2}}(\eta + u). \quad (5.4.26)$$

$e\varphi \ll F$ olsa (yadda saxlamaq lazımdır ki, bu şərt bəzən ödənilməyə də bilər), $F_{\frac{1}{2}}(\eta + u)$ -nu u -nun üstünə görə sıraya ayırıb, birinci iki hədlə kifayətlənə bilərik:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta + u) F_{\frac{1}{2}}(\eta) + \frac{\partial F_{\frac{1}{2}}(\eta)}{\partial \eta} \frac{u}{1!} + \dots \quad (5.4.27)$$

Bu ifadəni n' -in (5.4.26) ifadəsində nəzərə alsaq:

$$n' = n + \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \frac{\partial F_{\frac{1}{2}}(\eta)}{\partial \eta} u. \quad (5.4.28)$$

Bunu (5.4.22)-də yerinə yazsaq, alırıq:

$$\nabla^2 \varphi = q^2 \varphi. \quad (5.4.29)$$

Burada:

$$q^2 = \frac{4}{\pi} \sqrt{2} \frac{e^2 m^{*\frac{3}{2}} (k_0 T)^{\frac{1}{2}}}{\epsilon \hbar^3} \frac{\partial F_{\frac{1}{2}}(\eta)}{\partial \eta}. \quad (5.4.30)$$

Sferik simmetriyaya malik olan φ potensialı üçün aldığımız (5.4.29) tənliyinin (5.4.23) başlanğıc şərti daxilində həlli belədir:

$$\varphi = \frac{e}{\varepsilon r} e^{-qr}. \quad (5.4.31)$$

(5.4.31) ifadəsinin (5.4.29) tənliyinin həlli olduğunu, onu birbaşa yerinə yazmaqla yoxlamaq olar. Bunun üçün nəzərə almaq lazımdır ki, sferik simmetriyaya malik olan φ funksiyası üçün sferik koordinatlarda $\nabla^2 \varphi$ belə olacaq:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\varphi}{dr} \right). \quad (5.4.32)$$

Burada nəzərə alınmışdır ki, φ potensialı bucaqlardan asılı deyil və Laplas operatorunda bucaqlara görə φ -nin törəmələri sıfırdır. Aydındır ki, $z=1$ götürsək, (5.4.31) ifadəsi (5.4.6) ilə üst-üstə düşür. Ona görə q -nün

(5.4.30) ifadəsində hələlik naməlum olan $\frac{\partial F_1(\eta)}{\partial \eta}$ -ni tapsaq, onda

ekranlaşma radiusu $R_0 = \frac{1}{q}$ -ni tapmış olarıq və diferensial effektiv kəsiyin (5.4.10) ifadəsindən istifadə edə bilərik. q -nü hesablamaq üçün iki xüsusi hala baxaq.

a) Cırılma olmayan hal. Bu hal üçün Fermi inteqralının məlum ifadəsindən istifadə edək:

$$\frac{\partial F_1(\eta)}{\partial \eta} = \frac{d}{d\eta} \int_0^\infty e^{\eta-x} x^{\frac{1}{2}} dx = \frac{d}{d\eta} \left[e^\eta \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \right] = e^\eta \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \quad (5.4.33)$$

Digər tərəfdən:

$$e^\eta = \frac{n}{N_c}. \quad (5.4.34)$$

(5.4.33), (5.4.34) və (5.4.30)-dən istifadə etsək, ekranlaşma radiusu üçün belə düstur alarıq:

$$R_0 = \frac{1}{q} = \sqrt{\frac{\varepsilon k_0 T}{4\pi e^2 n}}. \quad (5.4.35)$$

R_0 -a Debay radiusu da deyirlər.

b) Tam cırılma olan hal. Bu halda Fermi inteqralı:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{2}{3} \eta^{\frac{3}{2}} \quad \text{və} \quad \frac{\partial F_{\frac{1}{2}}(\eta)}{\partial \eta} = \eta^{\frac{1}{2}}. \quad (5.4.36)$$

Digər tərəfdən

$$\eta = \frac{\hbar^2}{m^*} \cdot 2\pi^2 \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{1}{k_0 T}. \quad (5.4.37)$$

Bunları nəzərə alsaq

$$R_0 = \frac{1}{q} = \left[\frac{\varepsilon \hbar^2}{4m^* e^2} \left(\frac{\pi}{3n} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.4.38)$$

Artıq diferensial kəsiyin (5.4.10) ifadəsində $q = \frac{1}{R_0}$ məlum olduğu üçün, ondan istifadə edib transport effektiv kəsiyi hesablaya bilərik. Diferensial effektiv kəsiyi çıxararkən ekranlaşma nəzərə alındığı üçün indi səpilmə bucağına görə inteqrallamanı 0-dan π -yə qədər götürmək lazımdır.

$$\begin{aligned} \sigma_c &= \int_0^\pi \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) 2\pi \sin\theta d\theta = \\ &= 4 \left(\frac{m^* z e^2}{\hbar^2 \varepsilon} \right)^2 \cdot 2\pi \int_0^\pi \frac{(1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta}{\left(q^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^2}, \end{aligned} \quad (5.4.39)$$

buradakı inteqralı J_q ilə işarə edək.

$$J_q = \frac{1}{16k^4} \int_0^\pi \frac{2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \cdot 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta}{\left(\frac{q^2}{4k^2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} \right)^2}. \quad (5.4.40)$$

$t = \sin^2 \frac{\theta}{2}$, $dt = \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta$ əvəz etsək, inteqral sadə şəkllə düşər:

$$\begin{aligned} J_q &= \frac{1}{4k^4} \int_0^1 \frac{t dt}{\left(\frac{q^2}{4k^2} + t \right)^2} = - \frac{t}{4k^4 \left[\frac{q^2}{4k^2} + t \right]} \Big|_0^1 + \frac{1}{4k^4} \int_0^1 \frac{dt}{\frac{q^2}{4k^2} + t} = \\ &= \frac{1}{4k^4} \left[- \frac{4k^2}{q^2 + 4k^2} + \ln \left(1 + \frac{4k^2}{q^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.4.41)$$

Bu ifadəni (5.4.39)-də yerinə yazaq:

$$\sigma_c = 2\pi \left(\frac{z e^2 m^*}{\varepsilon \hbar^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{k^4} \left[\ln(1 + \beta) - \frac{\beta}{1 + \beta} \right], \quad (5.4.42)$$

burada adsız β parametrini belə işarə etmişik:

$$\beta = \frac{4k^2}{q^2} = \frac{4m^{*2} v^2}{\hbar^2 q^2} = \frac{8m^* E}{\hbar^2 q^2}. \quad (5.4.43)$$

σ_c -nin (5.4.42) ifadəsini biz səpici mərkəzə kiçik həyəcanlaşdırıcı səbəb kimi baxmaqla aldıq (buna Born yaxınlaşması deyirlər). $k = \frac{m^*v}{\hbar}$ olduğunu nəzərə alsaq, görərik ki, σ_c -nin hər iki ifadəsi demək olar ki, eynidir. Yalnız (5.4.18)-də enerjiden zəif asılı olan loqarifm vuruğu burada yenə də enerjiden zəif asılı olan orta mötərizənin daxilindəki vuruqla fərqlənir. Lakin xarici görünüşlərindəki fərqi baxmayaraq, hesablama zamanı hər iki ifadə eyni nəticə verir. Onların bir-birindən qismən fərqlənməsi isə ekranlaşma radiusunun müxtəlif yolla seçilməsi ilə əlaqədardır.

(5.4.42)-dən istifadə edib, relaksasiya müddətini hesablayaq:

$$\tau = \frac{1}{N_1 \sigma_c v} = \frac{\varepsilon^2 m^*}{2\pi^2 e^4 N_1} \cdot \frac{v^3}{\left[\ln(1+\beta) - \frac{\beta}{1+\beta} \right]}, \quad (5.4.44)$$

burada v -ni enerji vasitəsilə ifadə etsək:

$$\tau = \frac{\sqrt{2\varepsilon^2 m^{*1/2}}}{\pi^2 e^4 N_1} \cdot \frac{E^3}{\left[\ln(1+\beta) - \frac{\beta}{1+\beta} \right]} = \tau_{01} E^3. \quad (5.4.45)$$

Burada:

$$\tau_{01} = \left(\frac{\sqrt{2\varepsilon^2 m^{*1/2}}}{\pi^2 e^4 N_1} \right) \left[\ln(1+\beta) - \frac{\beta}{1+\beta} \right]. \quad (5.4.46)$$

Yenə də enerjiden asılılıq $\tau \sim E^3$ şəklindədir. (5.4.45) ifadəsinə τ üçün Bruks-Herrinq düsturu deyirlər.

Qeyd etmək lazımdır ki, (5.4.46) və ya onunla eyni olan (5.4.31) tipli potensialdan səpilmə zamanı elektronun dalğa vektoru q qədər dəyişir. Odur ki, Born metodunun yararlı olması üçün bu dəyişmə nəzərə alınmayacaq dərəcədə kiçik olmalıdır: $q \ll k$. Ona görə də hər bir konkret

halda bu yaxınlaşmanın yararlı olub-olmadığını $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = k_0 T$ və q -nün (5.4.35) və (5.4.38) ifadələrinin köməyi ilə yoxlamaq lazımdır.

§ 5.5. Neytral aşqar atomlarından səpilmə

Yükdaşıyıcıların neytral aşqar atomlarından səpilməsi ionlaşmış mərkəzlərdən səpilməyə nisbətən çox zəifdir, lakin elə şərait ola bilər ki, (xüsusilə aşağı temperaturalarda), onu nəzərə almamaq olmaz. II fəsildə gördük ki, kristalda neytral aşqar atomunda elektronun effektiv Bor radiusu qəfəs sabitindən çox böyük olur və onun orbiti onlarla elementar

özəyi əhatə edir. Belə atomda mərkəzdəki ionun elektrik sahəsinin ekranlanması ondan kifayət qədər böyük məsafədə baş verir. Bu cür neytral atomu dielektrik mühitdə yerləşdirilmiş hidrogen atomuna bənzətmək olar. Onda məsələyə effektiv kütləyə malik olan elektronun hidrogen atomundan səpilməsi kimi baxmaq olar (buna hidrogenəbənzər model deyirlər). Neytral hidrogen atomundan elektronun səpilməsi, məlum olduğu kimi, yaxşı tədqiq edilmişdir və alınan nəticələrdən istifadə etmək çətinlik törətmir. Lakin məsələnin dəqiq həlli bir sıra səbəbə görə mürəkkəbləşir. Yükdaşıyıcı neytral aşqar atomu ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində onda nöqtəvi dipol induksiyləyir və bu dipol öz növbəsində səpilmədə iştirak edir. Digər tərəfdən seçilməzlik (identiklik) prinsipinə görə toqquşma zamanı yükdaşıyıcı elektronla aşqar atomunun elektronu mübadilə nəticəsində yerlərini dəyişə bilər (mübadilə qarşılıqlı təsiri). Bundan başqa, aşqar atomu hidrogenə bənzədiyi üçün onun, hidrogen atomunda olduğu kimi, küllü miqdarda həyəcanlanmış halları olmalıdır. Yükdaşıyıcı ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində aşqar atomunun elektronu həyəcanlanmış səviyyələrə keçə bilər. Bu halda səpilmə qeyri-elastiki olur. Belə olduqda adətən atomun effektiv kəsiyini hesablamaq üçün təbiiq olunan təqribi yollar yararlı deyil.

Erqinsoy kiçik sürətli elektronların hidrogen atomundan səpilməsi nəzəriyyəsinə tətbiq edərək, göstərdi ki, elektronların enerjisi $E < \frac{1}{4} E_i$ (E_i - aşqar atomunun ionlaşma enerjisidir) olduqda neytral aşqar atomundan səpilmənin transport effektiv kəsiyi belə düsturla təyin edilir:

$$\sigma_c = \frac{20a_1}{k}, \quad (5.5.1)$$

burada k - səpilən elektronun dalğa vektorunun modulu, a_1 aşqar atomunun xarici elektronu üçün birinci effektiv Bor radiusudur:

$$a_1 = \left(\frac{m_0}{m^*} \right) \varepsilon \cdot a_0 = 0,53 \left(\frac{m_0}{m^*} \right) (A),$$

burada ε - dielektrik sabitidir. Erqinsoy məsələnin həllində ədədi hesablama yolundan istifadə etmişdir.

Relaksasiya müddətini hesablayaq:

$$\tau_H = \frac{1}{N_H \sigma_c v} = \frac{k}{20a_1 v N_H} = \frac{\pi m^*}{10a_1 h N_H}, \quad (5.5.2)$$

burada N_H -neytral aşqar mərkəzlərinin konsentrasiyasıdır. Buradan görünür ki, neytral aşqar mərkəzlərindən səpilmə zamanı relaksasiya müddəti yükdaşıyıcının enerjisindən və eləcə də temperaturdan asılı deyil (əlbət ki, əgər N_H temperaturdan asılı deyilsə). Ona görə də bu səpilmə özünü əsasən aşağı temperaturlarda göstərə bilər.

§ 5.6. Dislokasiyalardan səpilmə

Qeyd etmişdik ki, kristalda dislokasiyaların yaratdığı qüsurlar da özlərini yükdaşıyıcılar üçün səpici mərkəzlər kimi aparır. Əlbət ki, burada da Born yaxınlaşmasını tətbiq etməklə səpilmənin diferensial effektiv kəsiyini keçid ehtimalını (5.3.5) ifadəsindən istifadə etməklə tapa bilərik. Dekster və Zaytsın apardığı nəzəri hesablamalar göstərdi ki, elektrik yükü baxımından neytral olan dislokasiyalar üçün səth konsentrasiyasının $N_D = 10^8 \text{ sm}^{-2}$ qiymətlərinə qədər bu səpilmə mexanizmi nəzərə çarpacaq dərəcədə təsir yaratmır. Lakin təcrübədən məlumdur ki, bir sıra halda n -tip kristalda dislokasiyalar özünü akseptor mərkəzi kimi aparır. Belə olduqda hər bir dislokasiyaya kristalın daxilində müəyyən xətt parçası üzrə bərabər paylanmış birölçülü mənfi elektrik yükü kimi baxmaq olar. Bu cür mərkəz öz ətrafındakı fəzada müsbət yüklərin toplanmasına səbəb olur. Yüklü dislokasiyalardan səpilmə məsələsinə Rid baxmışdır. O, hər bir dislokasiyanı radius R olan yüklü silindr kimi götürmüşdür. Aydınır ki, bu cür mərkəzdən səpilmə güclü anizotropiyaya malikdir. Ən çox səpilmə elektron dislokasiya silindrinin doğuranına perpendikulyar hərəkət etdikdə, ən az səpilmə isə silindrin doğuranına paralel hərəkət etdikdə baş verməlidir. Ona görə də effektiv kəsiyi hesablayarkən bütün istiqamətlər üzrə ortalama aparmaq lazımdır. Burada biz hesablama aparmadan, relaksasiya müddəti üçün Ridin aldığı ifadəni verməklə kifayətlənək:

$$\tau_D = \frac{3}{8RN_D\nu} = \frac{3m^{\frac{1}{2}}}{8\sqrt{2}RN_D} E^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.6.1)$$

burada N_D - dislokasiyaların səth sıxlığı, R - dislokasiya silindrinin radiusudur. Göründüyü kimi, bu halda τ -nın yükdaşıyıcının enerjisindən asılılığı $\tau \sim E^{-\frac{1}{2}}$ şəklindədir.

Ridin apardığı hesablamalar göstərdi ki, məsələn, germaniumda elektronların konsentrasiyası 10^{15} sm^{-3} olduqda yüklü dislokasiya silindrinin radiusu $R \sim 3 \cdot 10^{-5} \text{ sm}$ tərtibində olur. Otaq temperaturunda $\nu = 10^7 \text{ sm/san}$, $N_D = 10^6 \text{ sm}^{-2}$ götürsək, $\tau_D = 1,25 \cdot 10^{-9} \text{ san}$ alırıq. Bu isə bir qədər sonra araşdıracağımız itilik rəqslərindən səpilmə mexanizmindəki nisbətən üç tərtib böyükdür. Odur ki, dislokasiyalardan səpilmə mexanizminin otaq temperaturunda nəzərə çarpacaq dərəcədə təsir yaratdığı üçün dislokasiyaların səth sıxlığı 10^9 sm^{-2} olmalıdır. Lakin bu cür kristal güclü deformasiyaya məruz qalmalıdır. Bununla belə aşağı temperaturalarda bir sıra hallarda dislokasiyalardan səpilməni nəzərə almaq lazım gəlir.

§ 5.7. Kristalın istilik rəqslərindən (akustik fononlardan) səpilmə

Kristalda atomların öz tarazlıq vəziyyəti ətrafında rəqsi nəticəsində kristalın potensialının ciddi periodikliyi pozulur. Bu isə yükdaşıyıcıların səpilməsinə səbəb olur. Məsələni ümumi şəkildə həll etmək üçün atomların rəqsi nəticəsində yükdaşıyıcıların enerjisinin dəyişməsinə (qarşılıqlı təsir enerjisini) hesablaşmaq lazımdır. Digər tərəfdən, atomlar sonlu ölçüyə malikdir və öz tarazlıq vəziyyətindən kənara çıxarkən deformasiyaya uğraya bilər. Bu deformasiyanı və onun yaratdığı qüvvə sahəsini müəyyənləşdirmək üçün dinamikanın çox cisim (zərrəcik) məsələsini həll etmək lazımdır. Lakin sonralar görərik ki, fonon qazı anlayışından istifadə etdikdə yükdaşıyıcıların istilik rəqslərindən səpilməsinə araşdırmaq kəskin sürətdə asanlaşır. Məlum olur ki, yükdaşıyıcıların səpilməsində bütün fononlar deyil, yalnız dalğa vektorları kiçik olan (elektron və deşiyin dalğa vektorları ilə eyni tərtibdə olan) fononlar iştirak edir, həm də elektronun fononla qarşılıqlı təsirini xarakterizə edən matris elementini hesablaşmaq elə bir prinsipial çətinlik tələtmir. Beləliklə, dinamika məsələsini həll etməyə ehtiyac qalmır.

Yükdaşıyıcının fononla qarşılıqlı təsiri iki cür baş verir: 1) elektron (və ya deşik) öz enerjisinin bir hissəsini kristal qəfəsinə verir, nəticədə hər hansı ω_q tezliyinə malik olan normal koordinatın kvant ədədi bir vahid artır, yeni səpilmə nəticəsində enerjisi $\hbar\omega_q$ və kvazi-impulsu $\hbar\mathbf{q}$ olan bir fonon yaranır; 2) səpilmə zamanı elektron kristal qəfəsindən müəyyən qədər enerji götürür, buna uyğun ω_q tezlikli normal koordinatın kvant ədədi bir vahid azalır. Deməli, enerjisi $\hbar\omega_q$ və kvazi-impulsu $\hbar\mathbf{q}$ olan bir fonon yox olur. Hər iki halda yükdaşıyıcı fononla qarşılıqlı təsir nəticəsində onunla enerji və kvazi-impuls mübadiləsində olur. Bu cür səpilmədə yalnız bir fonon iştirak edir: ya yeni bir fonon yaranır (birinci hal) və ya mövcud olan fononlardan biri yox olur (ikinci hal). Bir fononun iştirakı ilə baş verən belə səpilməyə birfononlu səpilmə mexanizmi deyirlər. Kristalda elektron və deşiklərin eyni zamanda bir neçə fononun iştirakı ilə səpilməsi də mümkündür. Buna çoxfononlu səpilmə deyirlər. Çoxfononlu prosesdə iki və daha çox fononun eyni zamanda elektronla görüşməsi tələb olunur. Ona görə də çoxfononlu səpilmənin başvermə ehtimalı kiçikdir və onu birfononlu səpilməyə nisbətən nəzərə almamaq olar.

Sadə kub kristalda elektronun istilik rəqslərindən səpilməsi mexanizmi üçün relaksasiya müddətini hesablaşaq. Bunun üçün əvvəlcə uyğun matris elementini hesablaşmaq lazımdır. Lakin matris elementindəki inteqralları açmaq uzun-uzadı hesablaşma aparmağı tələb edir. Həmin

hesablamaları getirmədən biz alınan nəticələri verəcəyik. Əvvəla, məlum olur ki, elektron istənilən fononla deyil, yalnız uzununa dalğalara uyğun gələn fononlarla qarşılıqlı təsirdə olur (onlardan səpilir). Digər tərəfdən, matris elementi iki halda sıfırdan fərqlidir (yəni $\vec{k}, N_{\vec{q},j} \rightarrow \vec{k}', N'_{\vec{q},j}$ keçidləri iki halda mümkündür).

a) səpilmədən sonra elektronun dalğa vektoru və enerjisi:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}, \quad (5.7.1)$$

$$E_{\vec{k}'} = E_{\vec{k}} + \hbar\omega_{\vec{q}}, \quad (5.7.2)$$

münasibətləri ödəyəndə; bu zaman son halda fononların sayı:

$$N'_{\vec{q}} = N - 1. \quad (5.7.3)$$

b) səpilmədən sonra

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}, \quad (5.7.4)$$

$$E_{\vec{k}'} = E_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}}, \quad (5.7.5)$$

olduqda. Bu halda

$$N'_{\vec{q}} = N + 1.$$

birinci hal elektronun bir fonon udmaqla səpilməsi, ikinci hal isə bir fonon buraxmaqla səpilməsi deməkdir. Hər iki halda enerjinin və kvazi-impulsun saxlanma qanunu ödənilir. Matris elementinin qiyməti birinci hal üçün:

$$\langle \vec{k}', N'_{\vec{q}} | \hat{H} | \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle = -\frac{2i}{3} \cdot \frac{Cq}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar N_{\vec{q}}}{2M\omega_{\vec{q}}}}, \quad (5.7.6)$$

ikinci hal üçün isə:

$$\langle \vec{k}', N'_{\vec{q}} | \hat{H} | \vec{k}, N_{\vec{q}} \rangle = \frac{2i}{3} \cdot \frac{Cq}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar(N_{\vec{q}} + 1)}{2M\omega_{\vec{q}}}}, \quad (5.7.7)$$

burada C sabiti enerji vahidinə malik olub elektronla fononların qarşılıqlı təsirini xarakterizə edir. Səpilmə prosesində keçid ehtimalının matris elementi ilə (5.3.5) əlaqəsini nəzərə alıb, fononun udulması ilə baş verən keçid ehtimalını $W^+(\vec{k}, \vec{k}')$, fononun buraxılması ilə baş verən keçid ehtimalını isə $W^-(\vec{k}, \vec{k}')$ -lə işarə etsək, elektronun fononlardan səpilməsinin tam ehtimalını belə alarıq:

$$\begin{aligned} W(\vec{k}, \vec{k}') &= W^+(\vec{k}, \vec{k}') + W^-(\vec{k}, \vec{k}') = W^+(\vec{k}, \vec{k} + \vec{q}) + W^-(\vec{k}, \vec{k} - \vec{q}) = \\ &= \varpi(q) N_{\vec{q}} \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}}) + (q)(N_{\vec{q}} + 1) \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}} - E_{\vec{k}} + \hbar\omega_{\vec{q}}). \end{aligned} \quad (5.7.8)$$

Burada

$$\varpi(q) = \frac{4\pi}{9N} \frac{C^2 q^2}{M\omega_{\vec{q}}}. \quad (5.7.9)$$

Qeyd etmişdik ki, səpilmə prosesi elastik olduqda relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etmək olar. Ona görə relaksasiya müddətini

hesablamaq üçün səpilmənin elastik olub-olmadığını yoxlayaq. Bundan ötrü kvazi-impulsun (dalğa vektorunun) və enerjinin saxlanma qanunlarından istifadə edək. Sadə zona quruluşu olan yarımkəçiriciyə

$$\text{baxaq } \left(E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right):$$

$$\begin{aligned} \vec{k}' &= \vec{k} \pm \vec{q}, \\ E_{\vec{k}'} &= E_i \pm \hbar \omega_q, \end{aligned} \quad (5.7.10)$$

və ya

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar v_c q. \quad (5.7.11)$$

Axıncı ifadəni aldıqda ω_q -nün əvəzinə $\omega_q = v_c q$ yazdıq. (5.7.11)-də v_c - uzununa səs dalğalarının sürətidir (sadə kristal quruluşuna baxdığımız üçün spektrin yalnız akustik budağı mövcuddur). (5.7.10) və (5.7.11)-də müsbət işarəsi fononun udulmasına, mənfi isə fononun buraxılmasına təfəvüt edir. k' -in (5.7.10) ifadəsini (5.7.11)-də yerinə yazıb, müəyyən sadələşdirmə apardıqdan sonra:

$$q = \mp 2k \cos \theta \pm \frac{2m^* v_c}{\hbar}, \quad (5.7.12)$$

θ \vec{k} və \vec{q} vektorları arasında qalan bucaqdır. Berabərliyin sağ tərəfindəki hədləri bir-biri ilə müqayisə edək. İkinci həddin tərtibini təyin etmək üçün $m^* = m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kq}$, $v_c = 2 \cdot 10^3 \text{ m/san}$ götürək ($\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ C} \cdot \text{san}$):

$$\frac{2m^* v_c}{\hbar} = \frac{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 2 \cdot 10^3}{1,05 \cdot 10^{-34}} \cdot \frac{1}{m} \approx 4 \cdot 10^3 \text{ m}^{-1}. \quad (5.7.13)$$

Birinci həddə $\cos \theta$ -nin orta qiymətinin tərtibi vahiddir ($\cos \theta, -1$ ilə $+1$ arasında dəyişir). Ona görə k -nin tərtibini müəyyən edək. Enerjinin orta qiymətinin $k_0 T$ olduğunu yada salsaq ($k_0 = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ C} \cdot \text{k}^{-1}$ Bolsman sabitidir):

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \langle E \rangle = k_0 T, \quad (5.7.14)$$

$$k = \hbar \sqrt{2m^* k_0 T} = \frac{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}}{1,05 \cdot 10^{-34}} \sqrt{T} \frac{1}{m} \approx 8,2 \cdot 10^3 \sqrt{T} \text{ m}^{-1}. \quad (5.7.15)$$

(5.7.13) və (5.7.15)-nin müqayisəsindən məlum olur ki, $T \gg 1K$ olduqda (5.7.12)-də ikinci həddi birinciye nisbətən nəzərə almamaq olar. Onda

$$q = \mp 2k \cos \theta. \quad (5.7.16)$$

Deməli, kvazi-impulsun və enerjinin saxlanma qanunundan məlum oldu ki, elektronlar elə fononları udur və ya buraxır ki, onların dalğa vektoru elektronların dalğa vektoru tərtibində ($q \approx k$) olsun. (5.7.16) ifadəsi

səpilmədə iştirak edən (elektronları səpən) fononların dalğa vektorlarının ən kiçik və ən böyük qiymətini tapmağa imkan verir:

$$q_{\min} = 0; q_{\max} = 2k. \quad (5.7.17)$$

(5.7.15)-dən görüldüyü kimi, otaq temperaturunda ($T = 300K$) elektronlar üçün dalğa vektorunun orta qiyməti $10^5 m^{-1}$ tərtibindədir, yeni səpilmədə iştirak edən fononların da dalğa vektorlarının orta qiyməti $10^5 m^{-1}$ tərtibindədir. Debay nəzəriyyəsinə görə isə dalğa vektorunun maksimum qiyməti:

$$q_{\max}^D = \left(\frac{6\pi^2}{\Omega_0} \right)^{1/3} \sim 10^{10} m^{-1}. \quad (5.7.18)$$

Bu isə $10^9 m^{-1}$ -dən çox-çox böyükdür. Deməli, elektron yalnız dalğa uzunluğu böyük (dalğa vektorları kiçik) olan fononlardan səpilir. Ona görə də yuxarıda yazdığımız $\omega = v_s q$ münasibətindən cürətlə istifadə edə bilərik.

Bu cür səpilmənin elastik olduğunu göstərmək çətin deyil. Bunun üçün səpilmədən sonra elektronun enerjisinin dəyişməsinin cüzi olduğunu göstərmək kifayətdir. Doğrudan da, məsələn, $T = 30K$ -də fononun enerjisi (bu, səpilən elektronun aldığı və ya verdiyi enerjiyə bərabərdir) ilə elektronun enerjisini müqayisə edək. Fononun enerjisi

$$\hbar\omega_q = \hbar v_s q = \hbar v_s k \sim 6 \cdot 10^{-4} eV. \quad (5.7.19)$$

Elektronun enerjisi isə:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \sim 3 \cdot 10^{-1} eV, \quad (5.7.20)$$

yəni

$$\frac{\hbar\omega_q}{E_k} \ll 1.$$

Bu isə səpilmənin elastik olması deməkdir.

Qeyd etmək lazımdır ki, $T \sim 1K$ olduqda elektronun enerjisi fononun enerjisi tərtibində olur və səpilmə zamanı elektronun enerjisinin dəyişməsinə nəzərə almamaq olmaz. Bu halda səpilmə qeyri-elastik olur. Beləliklə, aydın oldu ki, $T \gg 1K$ olduqda akustik rəqslərdən səpilmə elastikdir və relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etmək olar. Keçid ehtimalının ifadəsi artıq məlum olduğu üçün τ -nu (5.2.2) düsturundan təyin edə bilərik:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{\frac{\partial f_0}{\partial E'}}{\frac{\partial f_0}{\partial E}} \left(\frac{\vec{\chi}\vec{k}}{\vec{\chi}\vec{k}'} \right) \right] d\tau_k = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{(\vec{\chi}\vec{k}')}{(\vec{\chi}\vec{k})} \right] d\tau_k. \quad (5.7.21)$$

Səpilmə elastik olduğu üçün $E' = E$, $\chi' = \chi$, $\frac{\partial f_0}{\partial E'} = \frac{\partial f_0}{\partial E}$ götürdük. (5.7.2)-dən istifadə edək:

$$\frac{(\bar{\chi} \bar{k}')}{(\bar{\chi} \bar{k})} = \frac{(\bar{\chi}, \bar{k} \pm \bar{q})}{(\bar{\chi} \bar{k})} = \frac{(\bar{\chi} \bar{k})}{(\bar{\chi} \bar{k})} \pm \frac{(\bar{\chi} \bar{q})}{(\bar{\chi} \bar{k})} = 1 \pm \frac{(\bar{\chi} \bar{q})}{(\bar{\chi} \bar{k})}. \quad (5.7.22)$$

yerinə yazaq:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_n)} \mathcal{W}(\bar{k}, \bar{k}') \left[\mp \frac{(\bar{\chi} \bar{q})}{(\bar{\chi} \bar{k})} \right] d\tau_k. \quad (5.7.23)$$

(5.7.8) keçid ehtimalından istifadə etmək üçün delta-funksiyada $\hbar\omega_q$ -nü nəzərə almayaraq (səpilmə elastik olduğuna görə) və onun ifadəsini bir qədər dəyişdirək:

$$\begin{aligned} \delta(E_{\bar{k} \pm \bar{q}} - E_{\bar{k}}) &= \delta\left(\frac{k^2 k'^2}{8\pi^2 m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq}{m^*} \cos\theta + \right. \\ &\left. + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) = \delta\left(\pm \frac{\hbar^2 kq}{m^*} \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}\right) = \frac{m^*}{\hbar^2 qk} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos\theta\right), \end{aligned} \quad (5.7.24)$$

burada $\theta - \bar{k}$ və \bar{q} vektorları arasında qalan bucaqdır. δ - funksiyanın aşağıdakı məlum xassəsindən (5.7.24)-da istifadə etdik:

$$\delta(a \pm bx) = \frac{1}{b} \delta\left(\frac{a}{b} \pm x\right). \quad (5.7.25)$$

(5.7.24)-nı nəzərə alıb, (5.7.8)-ni (5.7.23)-də yerinə yazaq, həm də (5.7.10)-dən istifadə edib, dE_k üzrə inteqrallamadan $d\tau_q$ üzrə inteqrallamaya keçək. Burada keçid determinantı ± 1 -ə bərabərdir. Ona görə fononun udulması üçün $d\tau_k = d\tau_q$ buraxılması üçün $d\tau_k = -d\tau_q$ yazmalıyıq:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= -\frac{1}{4\pi^3} \int_{(V_q)} \mathcal{W}(q) N_q \frac{(\bar{\chi} \bar{q})}{(\bar{\chi} \bar{k})} \frac{m^*}{\hbar^2 qk} \delta\left(\frac{q}{2k} + \cos\theta\right) d\tau_q - \frac{1}{4\pi^3} \times \\ &\times \int_{(V_q)} \mathcal{W}(q) (N_q + 1) \frac{(\bar{\chi} \bar{q})}{(\bar{\chi} \bar{k})} \frac{m^*}{\hbar^2 qk} \delta\left(\frac{q}{2k} - \cos\theta\right) d\tau_q. \end{aligned} \quad (5.7.26)$$

Skalyar hasiləri açıq şəkildə yazaq:

$$(\bar{\chi} \bar{q}) = \chi q \cos\alpha, \quad (5.7.27)$$

$$(\bar{\chi} \bar{k}) = \chi k \cos\beta, \quad (5.7.28)$$

burada α χ ilə \bar{q} arasında, β isə $\bar{\chi}$ ilə \bar{k} arasında qalan bucaqdır. Bunları nəzərə aldıqdan sonra sferik koordinat sistemine keçək:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= -\frac{1}{\pi} \frac{m^*}{\hbar^2 k^2} \left[\int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \mathcal{W}(q) q^2 dq \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi N_q \delta\left(\frac{q}{2k} + \cos\theta\right) \frac{\cos\alpha}{\cos\beta} + \right. \\ &\left. + \int_{\varphi_{\min}}^{\varphi_{\max}} \mathcal{W}(q) q^2 dq \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi (N_q + 1) \delta\left(\frac{q}{2k} - \cos\theta\right) \frac{\cos\alpha}{\cos\beta} \right]. \end{aligned} \quad (5.7.29)$$

İkinci həddə q -yə görə inteqrallama sərhədinin (q_{\max})-dan (q_{\min})-a qədər olması (5.7.16)-dəki mənfi işarəsindən meydana çıxır.

$\cos \alpha$ -nı əvəz etmək üçün şəkil 5.8-də göstərilən sferik üçbucaqdan istifadə edək. Məlum olduğu kimi, sferik üçbucağın tərəflərindən birinin kosinusunu o biri iki tərəfin kosinuslarının həsili ilə onların sinuslarının aralarındakı bucağın kosinusuna hasilinin cəminə bərabərdir:

$$\cos \alpha = \cos \beta \cos \theta + \sin \beta \sin \theta \cos \varphi. \quad (5.7.30)$$

Bu ifadədən və şəkil 5.8-dən görüldüyü kimi, α, φ -dən asılıdır və (5.7.29)-də φ üzrə inteqrallama yalnız α -ya təsir edir. Ona görə bu inteqrallamamı ayrıca aparsaq, alarıq:

$$\int_0^{2\pi} \cos \alpha d\varphi = \cos \beta \cdot \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi + \sin \beta \sin \theta \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 2\pi \cdot \cos \beta \cos \theta. \quad (5.7.31)$$

İkinci həddin inteqralı sıfıra bərabərdir. (5.7.31)-ü (5.7.29)-də yerinə yazdıqda hər iki həddə $\cos \beta$ məxrəcdəki $\cos \beta$ ilə ixtisar olur və yalnız θ bucağından asılılıq qalır. θ -ya görə inteqrallama aparmaq üçün $\cos \theta = x$ əvəzləməsi aparaq. Onda birinci hədd üçün:

$$\begin{aligned} \int_0^{\pi} \cos \theta \sin \theta d\theta \delta \left(\frac{q}{2k} + \cos \theta \right) &= - \int_0^{-1} x \delta \left(\frac{q}{2k} + x \right) dx = \\ &= \int_1^0 x \delta \left(\frac{q}{2k} - (-x) \right) dx = - \frac{q}{2k}. \end{aligned} \quad (5.7.32)$$

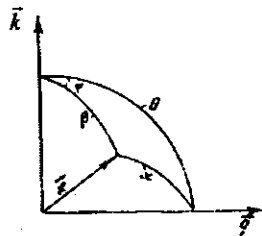
İkinci hədd üçün isə:

$$\int_0^{\pi} \cos \theta \sin \theta d\theta \delta \left(\frac{q}{2k} - \cos \theta \right) = - \int_0^{-1} x \delta \left(\frac{q}{2k} - x \right) dx = \frac{q}{2k}. \quad (5.7.33)$$

Bu qiymətləri (5.7.29)-də yerinə yazsaq və (5.7.17)-dan q -yə görə inteqrallama sərhədlərinin $q_{\min} = 0$ və $q_{\max} = 2k$ olduğunu nəzərə alsaq:

$$\begin{aligned} \frac{I}{\tau} &= \frac{m^*}{4\pi^2 \hbar^2 k^3} \left[\int_0^{2k} \sigma(q) q^3 N_q dq - \int_{2k}^0 \omega(q) q^3 (N_q + 1) dq \right] = \\ &= \frac{m^*}{4\pi^2 \hbar^2 k^3} \int_0^{2k} \omega(q) (2N_q + 1) q^3 dq. \end{aligned} \quad (5.7.34)$$

Hesablamamı axıra çatdırmaq üçün N_q -nün qeyri-tarazlıq halında necə olduğunu bilməliyik, lakin əksər hallarda fononların qeyri-tarazlıq paylanma funksiyası tarazlıq halındakından çox cüzi fərqlənir və biz Plank düstrundan istifadə edə bilərik (qeyd edək ki, bu mülahizə bəzən doğru



Şəkil 5.8. α və θ bucaqları arasında əlaqə

olmur, məsələn, yükdaşıyıcıların fononlar tərəfindən səvq olunması hadisəsində). Onda:

$$N_q = \langle N_q \rangle_{\text{av}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_q}{k_0T}} - 1}, \quad (5.7.35)$$

burada $e^{\frac{\hbar\omega_q}{k_0T}}$ -nin üstü vahiddən çox-çox kiçikdir. Ona görə onu sıraya ayırıb, birinci iki hədlə kifayətlənə bilərik. Doğrudan da:

$$\frac{\hbar\omega_q}{k_0T} = \frac{\hbar v_c q}{k_0T} \approx \frac{\hbar v_c k}{k_0T} = \frac{v_c p}{k_0T} = \frac{v_c \sqrt{2m^* k_0T}}{k_0T} \ll 1. \quad (5.7.36)$$

Burada

$$p \approx \sqrt{2m^* k_0T}$$

yazdıq. Deməli:

$$\langle N_q \rangle \approx \langle N_q + 1 \rangle = \frac{k_0T}{\hbar\omega_q} = \frac{k_0T}{\hbar v_c q}. \quad (5.7.37)$$

(5.7.9) və (5.7.37)-u (5.7.34)-da yerinə yazıb, q -yə görə inteqrallama aparsaq, alarıq:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{8}{9\pi} \cdot \frac{m^* C^2 k_0T}{NM\hbar^4 v_c^2} k. \quad (5.7.38)$$

Dalğa vektoru ilə enerjinin $k = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} E \right)^{\frac{1}{2}}$ əlaqəsini nəzərə alsaq, τ -nün ifadəsini belə yazma bilərik:

$$\tau = \frac{9\pi}{8\sqrt{2}} \cdot \frac{NM\hbar^4 v_c^2}{m^{\frac{3}{2}} C^2 k_0} \cdot \frac{E^{-\frac{1}{2}}}{T} = \tau_0 E^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.7.39)$$

burada

$$\tau_0 = \frac{9\pi}{8\sqrt{2}} \cdot \frac{NM\hbar^4 v_c^2}{m^{\frac{3}{2}} C^2 k_0 T} \quad (5.7.40)$$

işarə etdik. Deməli, sadə kub kristalda akustik rəqslərdən səpilmə mexanizmi üçün relaksasiya müddəti $T^{-1} E^{-\frac{1}{2}}$ hasilini ilə mütənəsibdir.

τ -nün ifadəsindən istifadə edib, sərbəst yolun uzunluğunu tapaq:

$$l = v\tau = \frac{9\pi}{8} \cdot \frac{NM\hbar^4 v_c^2}{m^{\frac{3}{2}} C^2 k_0} \cdot \frac{1}{T}. \quad (5.7.41)$$

Göründüyü kimi, bu səpilmə mexanizmində sərbəst yolun uzunluğu yükdaşıyıcının enerjisindən asılı deyil.

§ 5.8. Optik fononlardan səpilmə

İon rabitəli kristallarda keçiricilik elektronu akustik rəqslərə nisbətən optik rəqslərlə daha güclü qarşılıqlı təsirdə olur. Çünki ion kristallarda optik rəqslər baş verərkən hər bir elementar özkədə dəyişən dipol momenti yaranır. Bu işə yükdaşıyıcıların hərəkətinə daha çox təsir edir. Yenə də məlum olur ki, elektrik sahəsi yalnız uzununa dalğalar yayılarkən yaranır. Bu da öz-özünə aydındır, çünki yalnız bu halda kristalın həcmi dəyişilir (həcm deformasiyası), onun da nəticəsində bağlı yüklər yaranır.

Binar ion kristallarda dalğa vektoru \vec{q} və enerjisi $\hbar\omega$, olan optik fononun udulması və ya buraxılması zamanı elektronun \vec{k} halından \vec{k}' halına keçid ehtimalı aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = W(\vec{k}; \vec{k} \pm \vec{q}) = \omega(q) \left\{ \begin{matrix} N_q \\ N_{q+i} \end{matrix} \right\} \delta(E_{k \pm q} - E_k \mp \hbar\omega) \quad (5.8.1)$$

Burada

$$\omega(q) = \frac{4\pi^2 e^2 \omega_i}{\epsilon^*} \cdot \frac{1}{q^2} \quad (5.8.2)$$

(5.8.1)-də üst sətir və üstdəki işarə fononun udulması ilə baş verən səpilməni, alt sətir və altdakı işarə fononun buraxılması ilə baş verən səpilməni xarakterizə edir. Burada ω_i uzununa optik rəqslərin tezliyi, ϵ^* isə aşağıdakı ifadədən təyin olunan sabitdir:

$$\frac{1}{\epsilon^*} = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}, \quad (5.8.3)$$

burada ϵ_∞ - yüksək tezlikli, ϵ_0 - statik dielektrik sabitlərdir.

(5.8.1)-də δ -funksiya enerjinin saxlanma qanununu təmin edir. Effektiv kütləsi skalyar kəmiyyət olan sadə zona quruluşlu yarımkəçiricilər üçün impulsun və enerjinin saxlanma qanunundan istifadə edib, yazı bilərik:

$$\frac{\hbar^2(\vec{k} \pm \vec{q})^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_i \quad (5.8.4)$$

Bu ifadədə sol tərəfi açıb, müəyyən sadələşdirmə apardıqdan sonra:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \frac{\hbar^2 kq}{m^*} \cos\theta \mp \hbar\omega_i = 0, \quad (5.8.5)$$

burada θ, \vec{k} və \vec{q} vektorları arasında qalan bucaqdır. (5.8.5)-i q -yə görə gətirilmiş kvadrat tənlik şəklinə salaq və üçüncü (sərbəst) həddə alınan müsbət kəmiyyəti q_0^2 ilə işarə edək:

$$q_0^2 = \frac{2m^*}{\hbar} \omega_i \quad (5.8.6)$$

Onda (5.8.5)-dən alarıq:

$$q^2 \pm 2kq \cos\theta \mp q_0^2 = 0. \quad (5.8.7)$$

(5.8.7) kvadrat tənliyinin köklərini yazaq:

$$q_1 = -k \cos\theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2\theta + q_0^2}, \quad (5.8.8)$$

$$q_2 = k \cos\theta \pm \sqrt{k^2 \cos^2\theta - q_0^2}. \quad (5.8.9)$$

Burada iki temperatur oblastına baxaq.

1) Yüksək temperatur oblastı (Debay temperaturundan yuxarı temperaturlar).

$$k_0 T \gg \hbar\omega, \text{ və ya } k \gg q_0. \quad (5.8.10)$$

Bu halda (5.8.8) və (5.8.9)-də kökaltı ifadədə q_0^2 -ni nəzərə almaya bilərik. Onda həm fononun udulması və həm də buraxılması prosesi üçün q -nin dəyişmə intervalı:

$$q_{\min} = 0, \quad q_{\max} = 2k. \quad (5.8.11)$$

(5.8.10) şərti ödənilən temperaturalarda $N_q = N_q + l = \frac{k_0 T}{\hbar\omega}$ yaza bilərik.

Digər tərəfdən, (5.8.10) şərtinin ödənilməsi səpilmə prosesinin elastik olması deməkdir. Onda, akustik fononlardan səpilmədə olduğu kimi, (5.7.34) ifadəsinə uyğun olaraq alarıq:

$$\begin{aligned} \frac{l}{\tau} &= \frac{m^*}{4\pi^2 \hbar^2 k^3} \int_0^{2k} \omega(q)(2N_q + l)q^3 dq = \\ &= \frac{m^*}{4\pi^2 \hbar^2 k^3} \int_0^{2k} \frac{4\pi^2 e^2 \omega_l}{\varepsilon^*} \cdot \frac{2k_0 T}{\hbar\omega_l} q^3 dq = \frac{4m^* e^2 k_0 T}{\hbar^2 \varepsilon^*} \cdot \frac{l}{k}. \end{aligned} \quad (5.8.12)$$

Buradan:

$$\tau = \frac{l}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{e^2 m^{*2} k_0 T} \cdot E^2 = \tau_0 E^2, \quad (5.8.13)$$

$$\tau_0 = \frac{l}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{e^2 m^{*2} k_0 T}. \quad (5.8.14)$$

Sərbəst yolun uzunluğunu tapaq:

$$l = \tau v = \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{2e^2 m^*} \cdot \frac{E}{k_0 T}. \quad (5.8.15)$$

Burada $v = \left(\frac{2E}{m^*}\right)^{\frac{1}{2}}$ ifadəsindən istifadə etdik. (5.8.15)-dən göründüyü kimi, optik fononlardan səpilmə mexanizmi üçün yuxarı temperatur intervalında sərbəst yolun uzunluğu $\frac{E}{k_0 T}$ ilə mütənasibdir.

2) Aşağı temperatur oblastı (Debay) temperaturundan aşağı temperaturlar):

$$k_0 T \ll \hbar \omega, \text{ və ya } k \ll q_0. \quad (5.8.16)$$

Bu halda yükdəşıyıcıların orta kinetik enerjisi optik fononların enerjisindən kiçik olduğu üçün səpilmə əsasən fononların udulması ilə baş verir, fononların buraxılması ilə olan səpilməni isə nəzərə almamaq olar. Onda (5.8.8)-dən q -nün dəyişmə intervalını təyin edə bilərik. $\theta = 0$ və $\theta = \pi$ olduqda, q -nün yalnız müsbət qiymətlərinin fiziki mənə kəsb etdiyini nəzərə alsaq:

$$q_{\min} = \sqrt{k^2 + q_0^2} - k \quad (\theta = 0); \quad q_{\max} = \sqrt{k^2 + q_0^2} + k \quad (\theta = \pi). \quad (5.8.17)$$

(5.8.16) şərti ödənilən aşağı temperaturalarda elektronun səpilməsi qeyri-elastikdir. Ona görə bu şəraitdə relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etmək olmaz. Bununla belə, bəzi fiziki mülahizələr bu halda da relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etməyə imkan verir. Doğrudan da $k_0 T \ll \hbar \omega$, olduqda elektronların böyük əksəriyyəti səpilmə zamanı yalnız fononları uda bilər. Fonon udmuş elektronun enerjisi artır və o, orta enerjiden kəskin fərqlənir. Bu cür elektron elə həmin anda da özündən fonon buraxır. Çünki bu halda, (5.8.1)-dən görüldüyü kimi, elektronun fonon buraxma ehtimalının fonon udma ehtimalına nisbətən çox böyükdür:

$$\frac{N_q + I}{N_q} = I + \frac{I}{N_q} = I + e^{\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} - I = e^{\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} \gg I. \quad (5.8.18)$$

Bu cür fonon udma və həmin anda da fonon buraxma nəticəsində elektronun enerjisi çox cüzi (yalnız ω_q -in q -dən asılı olması üzündən) dəyişir, onun dalğa vektoru isə nəzərə çarpacaq dərəcədə dəyişilir. Bu mənərə səpilməni elastik səpilməyə bənzətməyə və relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etməyə imkan verir.

Relaksasiya müddətini hesablamaq üçün (5.8.12)-də fonon udma halına uyğun δ -funksiyanın ifadəsini sadələşdirək:

$$\delta \left(\frac{\hbar^2 (\bar{k} + \bar{q})^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \hbar \omega_q \right) = \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \delta \left(\frac{q^2 - q_0^2}{2kq} + \cos \theta \right). \quad (5.8.19)$$

(5.8.19) və (5.8.1)-ü (yalnız fonon udma prosesi üçün) (5.7.23)-də nəzərə alıb, bucaqlar üzrə inteqrallamaları aparsaq:

$$\frac{I}{\tau} = \frac{m^*}{4\pi^2 \hbar^2 k^3} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \omega(q) N_q \frac{q^2 - q_0^2}{q} q^2 dq, \quad (5.8.20)$$

$$N_q = \langle N_q \rangle = \frac{I}{e^{\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} - I}. \quad (5.8.21)$$

(5.8.21) və (5.8.2)-i (5.8.20)-də yerinə yazıb, (5.8.17) sərhədlərində inteqrallama apararaq, həm də ω_q -in q -dən zəif asılı olduğunu nəzərə alıb, onu sabit qəbul edək:

$$\begin{aligned} \frac{l}{\tau} &= \frac{m^* e^2 \omega_l}{\hbar^2 \varepsilon^* k^3} e^{-\frac{\hbar \omega_l}{k_B T}} \int_{\sqrt{k^2 + q_0^2} - k}^{\sqrt{k^2 + q_0^2} + k} \left(q - \frac{q_0^2}{q} \right) dq = \\ &= \frac{m^* e^2 \omega_l}{\hbar^2 \varepsilon^* k^3} e^{-\frac{\hbar \omega_l}{k_B T}} \left[2k \sqrt{k^2 + q_0^2} - q_0^2 \ln \frac{\sqrt{k^2 + q_0^2} + k}{\sqrt{k^2 + q_0^2} - k} \right]. \end{aligned} \quad (5.8.22)$$

Burada orta mötərizənin daxilindəki ifadədən q_0^2 -ni mötərizə xaricinə çıxarıb, alınan ifadəni $\frac{k}{q_0} = x \ll 1$ kəmiyyətinin üstlərinə görə sıraya

ayırısaq, sıfırdan fərqli birinci həddin tərtibi x^3 və özü də $\frac{4k^3}{3q_0}$ olacaq.

Bunu və q_0 -in (5.8.6) ifadəsini nəzərə alsaq, (5.8.22)-dən aşağı temperatur oblastı üçün τ -nin ifadəsini yazıb bilərik:

$$\tau = \frac{3\sqrt{2}\hbar^2 \varepsilon^*}{4e^2 m^{*2} (\hbar \omega_l)^{\frac{1}{2}}} \cdot e^{-\frac{\hbar \omega_l}{k_B T}} \quad (5.8.23)$$

Deməli, τ yükdaşıyıcının enerjisindən asılı deyil, temperaturun tərs qiymətindən isə eksponensial asılıdır. Sərbəst yolun uzunluğu:

$$l = v\tau = \frac{3}{2} \cdot \frac{\hbar^2}{e^2 m^*} \cdot \varepsilon^* \left(\frac{E}{\hbar \omega_l} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\hbar \omega_l}{k_B T}}, \quad (5.8.24)$$

burada $a_B = \frac{\hbar^2}{e^2 m^*} \varepsilon^*$ elektron üçün «effektiv Bor radiusu» adlandırılı bilər.

$e^{-\frac{\hbar \omega_l}{k_B T}}$ böyük ədəd olduğu üçün bu halda sərbəst yolun uzunluğu elementar özəyin ölçüsündən çox böyük olur və deməli, relaksasiya müddəti anlayışından istifadə etmək olar.

§ 5.9. Bir neçə səpilmə mexanizminin eyni zamanda mövcud olduğu hal (ümumi hal)

Biz yuxarıda əsas səpilmə mexanizmlərini araşdırdıq və relaksasiya müddətini hər bir mexanizm üçün hesablayarkən qəbul etdik ki, kristalda yalnız bir səpilmə mexanizmi təsir göstərir. Lakin real kristallarda əksər halda bir neçə səpilmə mexanizmi eyni zamanda təsir göstərir. Ona görə ümumi hal üçün relaksasiya müddətinin ifadəsini tapaq. Bunun üçün elektronun \vec{k} halından \vec{k}' halına keçid ehtimalından istifadə edək. Aydındır ki, elektron bir səpilmədə iştirak etdikdə, eyni zamanda digərində də iştirak edə bilməz. Belə olduqda ümumi keçid ehtimalı $W(\vec{k}, \vec{k}')$ ayrı-ayrı hadisələrin (səpilmə mexanizmlərinin) ehtimalları $W_i(\vec{k}, \vec{k}')$ cəminə bərabər olacaq:

$$\omega(\vec{k}, \vec{k}') = \omega_1(\vec{k}, \vec{k}') + \omega_2(\vec{k}, \vec{k}') + \dots + \omega_n(\vec{k}, \vec{k}'). \quad (5.9.1)$$

Keçid ehtimalının bu ifadəsini relaksasiya müddətinin ümumi (5.2.2) düsturunda yerinə yazaq:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W(\vec{k}, \vec{k}') \left[1 - \frac{f^0(\vec{k}')}{f^0(\vec{k})} \right] d\tau_k = \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W_1 \left[1 - \frac{f^0(\vec{k}')}{f^0(\vec{k})} \right] d\tau_k + \\ &+ \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W_2 \left[1 - \frac{f^0(\vec{k}')}{f^0(\vec{k})} \right] d\tau_k + \dots + \frac{1}{4\pi^3} \int_{(v_s)} W_n \left[1 - \frac{f^0(\vec{k}')}{f^0(\vec{k})} \right] d\tau_k = \\ &= \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots + \frac{1}{\tau_n} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\tau_i}. \end{aligned} \quad (5.9.2)$$

Burada τ_i - kristalda yalnız i -ci səpilmə mexanizmi təsir etdikdə ona uyğun relaksasiya müddətidir. Deməli, ümumi relaksasiya müddətinin tərs qiyməti ayrı-ayrı səpilmə mexanizmlərinin relaksasiya müddətlərinin tərs qiymətlərinin cəminə bərabərdir. Aydın ki, ümumi hal üçün relaksasiya müddətinin enerjiden asılılığı artıq $\tau = \tau_0 E^r$ (r - sabitdir) şəklində olmayacaqdır.

§ 5.10. Yürüklüyün temperaturdan asılılığı

Ayrı-ayrı səpilmə mexanizmləri üçün relaksasiya müddətinin ifadəsindən istifadə edib, dreyf yürüklüyünün temperaturdan asılılığını müəyyən edək. Bunun üçün yürüklüyün (4.4.5) ümumi düsturundan və τ üçün yuxarıda aldığımız ifadələrdən istifadə edəcəyik. (4.4.5)-i açıq şəkildə yazaq:

$$\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle = \frac{e}{m^*} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \tau e^{-\tau} x^{\frac{3}{2}} dx, \quad (5.10.1)$$

burada $x = \frac{E}{k_0 T}$ - götürülmüş enerjidir. Elektron və ya deşiyə aid olan parametrləri indeksiz yazdıq. Alınan yekun ifadələr hər iki yükdaşıyıcı üçün istifadə oluna bilər. Araşdırdığımız bütün səpilmə mexanizmləri üçün relaksasiya müddətinin enerjiden asılılığı belədir:

$$\tau = \tau_0 E^r, \quad (5.10.2)$$

burada r -sabit ədəddir, τ_0 isə sabit kəmiyyət olub, yalnız temperaturdan asılıdır. r və τ_0 -ın hələlik konkret qiymətlərindən istifadə etmədən (5.10.2)-i (5.10.1)-də yerinə yazıb, inteqralı ümumi şəkildə hesablayaq. İnteqralı J_r -lə işarə edək:

$$J_r = \int_0^\infty \tau e^{-\tau} x^{\frac{3}{2}} dx = \tau_0 (k_0 T)^r \int_0^\infty x^{r+\frac{3}{2}} e^{-x} dx = \tau_0 (k_0 T)^r \Gamma\left(\frac{5}{2} + r\right). \quad (5.10.2 a)$$

burada Γ -Eylerin qamma-funksiyasıdır. (5.10.2,a)-nı (5.10.1)-də yerinə yazaq:

$$\mu = \frac{e}{m^*} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \tau_0 (k_0 T)^r \Gamma\left(\frac{5}{2} + r\right). \quad (5.10.3)$$

Hər hansı səpilmə mexanizmi üçün yürüklüyün konkret ifadəsini almaq üçün r və τ_0 -in qiymətlərini (5.10.3)-də yerinə yazıb, qamma funksiyasını da hesablamaq lazımdır. Bunu biz aşağıda edəcəyik.

1. İonlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə. Bu halda relaksasiya müddətinin (5.4.20) və ya (5.4.45) ifadəsindən istifadə etməliyik:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{e}{m^*} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sqrt{2} \varepsilon^2 m^{*\frac{1}{2}} \pi^2 e^4 N_i \frac{(k_0 T)^{\frac{3}{2}} \cdot \left(\frac{E}{k_0 T}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-x} x^{\frac{3}{2}} dx}{\ln \left[1 + \left(\frac{\varepsilon E}{N_i^{\frac{1}{3}} z e^2} \right)^2 \right]} = \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{3\pi^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{\varepsilon^2 (k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{m^{*\frac{1}{2}} z^2 e^3 N_i} \int_0^\infty \frac{x^3 e^{-x} dx}{\ln \left[1 + \left(\frac{\varepsilon E}{N_i^{\frac{1}{3}} z e^2} \right)^2 \right]}. \end{aligned} \quad (5.10.4)$$

İnteqralları ifadədə məxrəc (loqarifm) enerjiden zəif asılıdır. Onu sabit vuruq kimi inteqraldan kənara çıxara bilərik. Xətanı azaltmaq məqsədi ilə həmin vuruqda E -nin övəzinə onun inteqral altındakı $y = x^3 e^{-x}$ funksiyasının maksimumuna uyğun gələn qiymətini yazaq. Həmin qiyməti y -in maksimumluq şərtindən tapaq:

$$y' = 3x^2 e^{-x} - x^3 e^{-x} = 0, \quad (5.10.5)$$

$$x = 3 \text{ və ya } E = 3k_0 T. \quad (5.10.6)$$

Deməli, (5.10.4)-də loqarifmlı ifadədə E -nin övəzinə $E = 3k_0 T$ yazıb, həmin vuruğu inteqraldan kənara çıxara bilərik. Onda inteqral da sadə şəkllə düşər:

$$\int_0^\infty x^3 e^{-x} dx = \Gamma(4) = 6. \quad (5.10.7)$$

Onda (5.10.4)-dən

$$\mu_1 = \frac{8\sqrt{2} \varepsilon^2 k_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}} z^2 e^3 m^{*\frac{1}{2}} N_i} \cdot \frac{T^{\frac{3}{2}}}{\ln \left[1 + \left(\frac{3\varepsilon k_0 T}{N_i^{\frac{1}{3}} z e^2} \right)^2 \right]} = \mu_{01} T^{\frac{3}{2}}, \quad (5.10.8)$$

$$\mu_{01} = \frac{8\sqrt{2}\varepsilon^2 k_0^{\frac{3}{2}}}{\pi^2 z^2 e^3 m^{*\frac{1}{2}} N_1} \cdot \frac{1}{\ln \left[1 + \left(\frac{3ek_0 T}{N_1^{\frac{1}{2}} z e^2} \right)^2 \right]} \quad (5.10.9)$$

İonlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə mexanizmi üçün yürüklük temperaturdan $\mu \sim T^{\frac{3}{2}}$ şəklində asılıdır. Eyni nəticəni (5.4.45) düsturundan istifadə etməklə də ala bilərik.

2. Neytral aşqar mərkəzlərindən səpilmə. Bu halda, (5.5.2)-dan görüldüyü kimi, τ enerjiden asılı deyil ($r=0$) və

$$\tau_{0H} = \frac{m^*}{20a_1 \hbar N_H} \quad (5.10.10)$$

(5.10.3)-də $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}$ və $\tau, -1$ yerinə yazsaq, alırıq:

$$\mu_H = 20a_1 \hbar \cdot \frac{1}{N_H}, \quad (5.10.11)$$

burada $a_1 = \left(\frac{m_0}{m^*}\right) a_0$, a_0 -hidrogen atomu üçün birinci Bor radiusudur. Görüldüyü kimi, N_H -neytral aşqar mərkəzlərin konsentrasiyası temperaturdan asılı olmadıqda yürüklük temperaturdan asılı deyil.

3. Dislokasiyalardan səpilmə. Bu mexanizm üçün (5.6.1)-dən aydındır ki, $r = -\frac{1}{2}$ və

$$\tau_{0D} = \frac{3m^{*\frac{1}{2}}}{8\sqrt{2}RN_D} \quad (5.10.12)$$

onda:

$$\Gamma\left(\frac{5}{2} - \frac{1}{2}\right) = \Gamma(2) = 1. \quad (5.10.13)$$

Bu ifadələri (5.10.3)-də yerinə yazsaq:

$$\mu_D = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi} \cdot \frac{e}{m^{*\frac{1}{2}} RN_D} \cdot \frac{T^{\frac{1}{2}}}{k_0^{\frac{1}{2}}} = \mu_{0D} \cdot T^{\frac{1}{2}}. \quad (5.10.14)$$

Temperaturdan asılılıq $\mu_D \sim T^{\frac{1}{2}}$ şəklindədir.

4. Kristalın istilik rəqslərindən (akustik fononlardan) səpilmə. Kristalın akustik rəqslərindən səpilmə mexanizmi üçün τ -nun (5.7.39) ifadəsindən məlum olur ki, $r = -\frac{1}{2}$,

$$\tau_0 = \frac{9\pi}{8\sqrt{2}} \cdot \frac{NM\hbar^4 v_c^2}{m^{3/2} C^2} \cdot \frac{1}{k_0 T}. \quad (5.10.15)$$

Yenə də $\Gamma(2) = 1$. Bunları (5.10.3)-də istifadə edək:

$$\mu_{ak} = \frac{3\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{eNM\hbar^4 v_c^2}{m^{3/2} C^2 k_0^2} \cdot T^{-3/2} = \mu_0^a T^{-3/2}. \quad (5.10.16)$$

$T^{-3/2}$ -nin qarşısındakı sabit vuruğu μ_0^a ilə işarə etdik. Akustik fononlardan səpilmə mexanizmində $\mu_{ak} \sim T^{-3/2}$ temperatur asılılığı ödənilir. Bir cəhəti də qeyd edək ki, bu halda yürüklük effektiv kütlənin $\left(-\frac{5}{2}\right)$ -ci dərəcəsi ilə mütənasib olub, ondan daha kəskin asılıdır.

5. Optik fononlardan səpilmə (ion kristallarda). Burada iki hala baxaq:

a) Debay temperaturundan yüksək temperatur oblastı:

$$r = \frac{1}{2}, \Gamma\left(\frac{5}{2} + \frac{1}{2}\right) = \Gamma(3) = 2$$

və

$$\tau_0^{on} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{e^2 m^{3/2} k_0 T}. \quad (5.10.17)$$

Onda (5.10.3)-dən

$$\mu_{on} = \frac{2\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{m^{3/2} e \cdot k_0^2} \cdot T^{-1/2} = AT^{-1/2}, \quad (5.10.18)$$

burada $T^{-1/2}$ -in qarşısındakı ümumi sabit vuruğu A ilə işarə etdik.

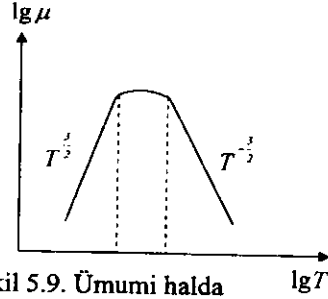
b) Debay temperaturundan aşağı temperaturalarda, (5.8.23)-dan görüldüyü kimi, τ yükdaşıyıcıların enerjisindən asılı deyil. Onda:

$$\mu_{on} = \frac{9\sqrt{2}\pi}{16} \cdot \frac{\hbar^2 \varepsilon^*}{m^{3/2} e (\hbar\omega_1)^{1/2}} e^{\frac{\hbar\omega_1}{kT}} = Be^{\frac{\hbar\omega_1}{kT}}. \quad (5.10.19)$$

EkspONENTİN qarşısındakı sabit vuruğu B ilə işarə etdik. Optik fononlardan səpilmə mexanizmində aşağı temperatur oblastında yürüklük temperaturdan kəskin asılıdır.

Ümumi halda yürüklüyün temperatur asılılığı 5.9.-cu şəkildə göstərilən kimidir.

Aşağı temperaturlarda ionlaşmış aşqar mərkəzlərindən səpilmə, yuxarı temperaturlarda isə kristal qəfəsin istilik rəqslərindən səpilmə daha üstün rol oynayır. Bu səbəbdən əyri şəkildə göstərilən kimi maksimuma malik olur. Aralıq oblastda hər iki növ səpilmənin yaratdığı pay eyni tərtibdədir.

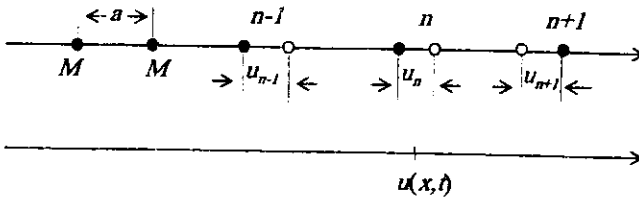


Şəkil 5.9. Ümumi halda yürüklüyün temperatur asılılığı

§ 5.11. Kristal qəfəsdə atomların rəqsi

Kristal qəfəsdə atomlar sükunətdə olmayıb, arası kəsilmədən istilik rəqslərində iştirak edir. Sıfırıncı rəqsləri nəzərə almasaq, yalnız mütləq sıfır temperaturda kristal qəfəsin düyün nöqtələrində atomların sükunətdə olduğunu qəbul etmək olar. $T > 0K$ halında hər bir atom öz tarazlıq vəziyyəti ətrafında rəqsi hərəkətdədir və atomlar arasında mövcud olan müxtəlif kimyəvi rabitələr hesabına bu rəqslər dalğa şəklində kristal boyunca yayılır. Atomun öz tarazlıq vəziyyətindən kənara çıxması kristalın ideal periodikliyini pozur və nəticədə kinetik hadisələrin gedişinə ciddi təsir göstərir. Bu təsiri aydınlaşdırmaq üçün kristalda atomların rəqsi hərəkətinin dinamikasını araşdıraq. Sadəlik üçün əvvəlcə birölçülü kristala baxaq.

Fərz edək ki, birölçülü qəfəs hər birinin kütləsi M olan neytral atomlardan ibarətdir olsun və qəfəs sabiti a -dır. Hər elementar qəfəsə bir atom düşür. Bir qəfəs nöqtəsini başlanğıc olaraq seçək və digər qəfəs nöqtələrini nömrələyək (şəkil 5.10).



Şəkil 5.10. Birölçülü qəfəsdə atomların rəqsi

Atomların sağa doğru yerdəyişmələrini müsbət, sola doğru yerdəyişmələrini mənfi qəbul edək. Buna görə, şəkil 5.10-da $u_n(t) > 0$; $u_{n+1}(t) > 0$; $u_{n-1}(t) < 0$ -dir.

Qəfəsdəki hər atom qonşuları ilə əlaqədar olduğundan, bir atomun rəqsi dalğa şəklində bütün qəfəs boyu yayılır. Bu hərəkəti izah etmək üçün hər hansı n nömrəli atomun klassik hərəkət tənliyini yazaq:

$$M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = F_n. \quad (5.11.1)$$

Burada F_n – n nömrəli atoma qonşuları tərəfindən təsir edən qüvvədir. F_n qüvvəsinin açıq ifadəsini yazmaq üçün olduqca zəruri iki fərziyyədən istifadə edək:

1. Atomlar arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvəsinin potensialı yerdəyişməyə görə parabolik olsun, $U(x) = -U_0 + \frac{1}{2} \beta x^2$, yəni atomlar arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvəsi kvazi elastikdir: $F = -\beta x$.

2. Atomlar ən yaxın qonşuları ilə qarşılıqlı təsirdə olur, yəni n nömrəli atom yalnız $(n-1)$ və $(n+1)$ nömrəli atomların yerdəyişmələrinin təsiri altında ola bilər. $(n\pm 2)$, $(n\pm 3)$ və s. nömrəli atomların yerdəyişməsindəki dəyişmələri n -ci atomun vəziyyətinə təsir etmir.

Bu iki fərziyyəyə əsasən:

$$F_n = F_{n,n-1} + F_{n,n+1} = -\beta(u_n - u_{n-1}) - \beta(u_n - u_{n+1}) \quad (5.11.2)$$

və ya

$$F_n = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \quad (5.11.3)$$

yaza bilərik. Beləliklə, n -ci atomun $u_n(t)$ yerdəyişməsi üçün bu hərəkət tənliyi belədir:

$$M \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) \quad (5.11.4)$$

Bu tənlikdən görüldüyü kimi, $u_n(t)$ funksiyasını təyin etmək üçün qonşu atomların yerdəyişmələrini (u_{n-1} və u_{n+1} funksiyalarını) də bilmək lazımdır və bunlar üçün hərəkət tənliklərini yazmalıyıq. Bu təqdirdə u_{n-1} və u_{n+1} yerdəyişmələri də məlum olmalıdır. Beləliklə, (5.11.4) tənliyi çox sayda tənliklərdən ibarət olub, tənliklər sistemini yaradır. Bu tənliklər sisteminin həlli isə praktik olaraq mümkün deyil.

Qarşımıza çıxan bu çətinliyi aradan qaldırmaq üçün maddi nöqtələrdən təşkil olunmuş birölçülü qəfəs (zəncir) yerinə kəsilməz nazik telə baxaq (şəkil 5.10). Bu fiziki yaxınlaşma uzun dalğalar üçün mümkündür. Telin x nöqtəsinin t anındakı yerdəyişməsi $u(x,t)$ üçün dalğa tənliyi belədir:

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = v_0^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \quad (5.11.5)$$

Burada v_0 - telde yayılan elastik dalğaların (və ya səs dalğalarının) yayılma sürətidir. Məlum olduğu kimi, (5.11.4) tənliyinin həlli

$$u(x, t) = Ae^{i(qx - \omega t)} \quad (5.11.6)$$

şəklindədir. Burada A – yayılan dalğanın amplitudu, q – dalğa ədədi, ω – tezliyi. (5.11.6) ifadəsini (5.11.5) tənliyində yerinə qoysaq, tezlik ilə dalğa ədədi arasında çox sadə bir ifadə əldə edilir:

$$\omega(q) = v_0 q. \quad (5.11.7)$$

Bu ifadə q – dalğa vektoru olduğundan, q və ω sıfırla sonsuzluq arasında dəyişir:

$$0 \leq q \leq \infty; \quad 0 \leq \omega \leq \infty.$$

İndi (5.11.4) tənliyinə qayıdaq. Bu tənliyin həlli də (5.11.6) ifadəsi şəklində olsun, ancaq birölcümlü qəfəs halında x dəyişəni yalnız müəyyən qiymətlər ala bilər, yəni $x = na$ olur. Beləliklə, (5.11.4) tənliyinin həllini

$$u_n(t) = Ae^{i(n\omega t - naq)} \quad (5.11.8)$$

şəklində yazsaq dilerik. (5.11.8) ifadəsini (5.11.4) də yerinə yazsaq, tezlik üçün bir tənlik alarıq

$$-M\omega^2 = -\beta(2 - e^{-i\omega a} - e^{i\omega a}). \quad (5.11.9)$$

Buradan:

$$\omega^2 = 2 \frac{\beta}{M} (1 - \cos aq) = 4 \frac{\beta}{M} \sin^2 \frac{aq}{2} \quad (5.11.9a)$$

və ya

$$\omega(q) = \omega_0 \left| \sin \frac{aq}{2} \right| \quad (5.11.10)$$

dispersiya ifadəsi alınır. Burada

$$\omega_0 = 2 \sqrt{\frac{\beta}{M}} = \omega_{\max} \quad (5.11.11)$$

birölcümlü sadə qəfəsin maksimum rəqs tezliyidir. $aq \ll 1$ və ya uzun dalğalar $\lambda \gg 2\pi a$ üçün (5.11.10) ifadəsini sıraya ayırırsaq,

$$\omega(q) \approx \omega_0 \frac{aq}{2} = \sqrt{\frac{\beta}{M}} aq \quad (5.11.12)$$

alırıq.

Məlumdur ki, elastik teldə səs sürəti $v_0 = \sqrt{E/\rho}$ -dir, burada E – telin Yunq modulu və ρ telin xətti sıxlığıdır. Birölcümlü qəfəs halında isə $\rho = \frac{M}{a}$ -dir və Yunq modulu üçün

$$E = \frac{\text{qüvvə}}{\text{nisbi yerdəyişmə}} = \frac{|f_{n,n-1}|}{|u_n - u_{n-1}|} a = \beta a \quad (5.11.13)$$

əldə edirik. Beləliklə, səs sürəti:

$$v_0 = \sqrt{\frac{\beta}{M}} a \quad (5.11.14)$$

olur. (5.11.12) və (5.11.14) bərabərliklərini birləşdirsək, elastik tel üçün $\omega(q) = v_0 q$ ifadəsini əldə edirik. Beləliklə, uzun dalğa yaxınlaşmasında birölçülü qəfəsin elastik tel ilə əvəzlənməsini əsaslandırmış olduq.

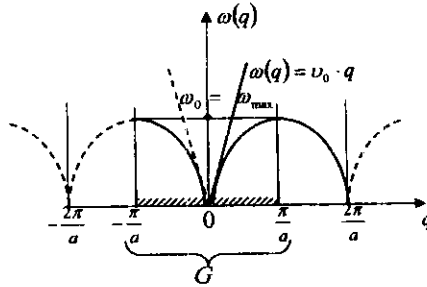
Elastik tel və birölçülü qəfəs üçün alınan (5.11.7), (5.11.10) dispersiya ifadələrinə uyğun qrafiklər şəkil 5.11-də göstərilmişdir.

Göründüyü kimi, tel üçün tezlik $0 \leq \omega \leq \infty$ aralığında istənilən qiymət aldığı halda birölçülü qəfəs üçün tezlik məhdud $0 \leq \omega \leq \omega_{\max}$ aralığında dəyişir, yəni tezlik dalğa ədədinin periodik funksiyasıdır.

Əgər (5.11.8) dalğa funksiyasında q yerinə $q' = q + b_g$ yazsaq, (burada $b_g = \frac{2\pi}{a} g$ tərs qəfəs vektoru və $g = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ kəmiyyəti tam ədədlərdir),

$$u'_n(t) = A e^{i(q' \omega - \omega t)} = A e^{i(q \omega - \omega t)} \cdot e^{i 2\pi g n} = u_n(t) \quad (5.11.15)$$

alınır, çünki $\exp(i 2\pi g n) = \exp(2\pi i \cdot \text{tam ədəd}) = 1$ -dir.



Şəkil 5.11. Elastik tel və birölçülü qəfəs üçün rəqs tezliklərinin dalğa ədədindən asılılığı

Buradan belə nəticə çıxır: q və $q + \left(\frac{2\pi}{a}\right)g$ dalğa ədədləri ekvivalentdir və bunlara uyğun gələn yerdəyişmələr eynidir. Başqa sözlə desək, q dalğa ədədinin bir-birindən fərqli qiymətlərini təyin etmək üçün $\frac{2\pi}{a}$ intervalına baxmaq kifayətdir. Bu intervalı

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq +\frac{\pi}{a} \quad (5.11.16)$$

olaraq seçmək düzgündür. Bilirik ki, dalğa ədədinin asılı olmayaraq dəyişdiyi bu intervala **birinci Brilyüen zonası** deyilir. (5.11.10) bərabərliyi və şəkil 5.11.3-dən göründüyü kimi, $\omega(q)$ periodik funksiyasıdır, yəni $\omega(q) = \omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right)$. İndi q dalğa ədədinin (5.11.16) intervalında (birinci Brilyüen zonasında) neçə qiymət aldığına baxaq. Bunun üçün sərhəd şərti olaraq Born-Karman sərhəd şərtindən istifadə

edək. Fərz edək ki, baxdığımız birölçülü makroskopik qəfəs çox böyük G sayda atomdan ibarətdir. Born-Karman sərhəd şərtinə görə:

$$u_{n+G}(t) = u_n(t) \quad (5.11.17)$$

olmalıdır. Əgər (5.11.8) dalğa funksiyasında (5.11.17) sərhəd şərtini nəzərə alsaq, bu şərtin ödənilməsi üçün $\exp(\pm iqaG) = 1$, yəni $qaG = 2\pi g$ olmalıdır, g – tam ədəddir. Buradan

$$q = \frac{2\pi}{aG} g \quad g = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.11.18)$$

olur, burada G – çox böyük tam ədəddir (qəfəsdəki atomların sayı). Dalğa ədədinin (5.11.18)-dəki qiymətini (5.11.16) bərabərliyində yerinə qoysaq,

$$-\frac{G}{2} \leq g \leq +\frac{G}{2} \quad (5.11.19)$$

alınır. Buna görə $g = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm G/2$ qiymətlərini alır. G –nin hər qiymətinə bir q uyğun olduğuna və hər q qiymətinə bir $\omega(q)$ tezliyi uyğun gəldiyinə görə ((5.11.10) bərabərliyinə bax.), dalğa ədədi $-\pi/a \leq q \leq \pi/a$ intervalında və tezlik $0 \leq \omega \leq \omega_{\max}$ intervalında G ədədi sayda diskret qiymətlər alır.

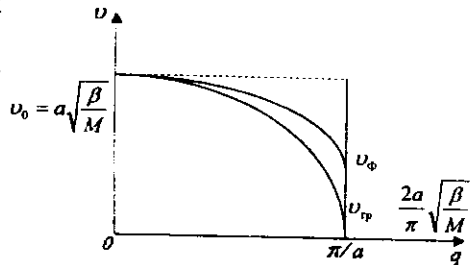
G ədədi eyni zamanda birölçülü qəfəsin sərbəstlik dərəcələrinin sayı olduğundan birölçülü sadə qəfəsdə mümkün olan tezliklərin sayı sonludur və onun sərbəstlik dərəcələrinin sayına bərabərdir.

Birölçülü kristalda atomların sayı (G) artdıqca, q –nün iki qonşu qiyməti arasındakı fərq $\Delta q = 2\pi/aG$ azalır. Bununla əlaqədar olaraq, birölçülü qəfəs ilə kəsilməz teldə yayılan dalğalar arasındakı iki fərqi göstərək:

1. Teldə dalğa ədədi $0 \leq q \leq \infty$ intervalında kəsilməz olaraq dəyişdiyindən, teldə yayılan

dalğanın dalğa uzunluğu $\infty \leq \lambda \leq 0$ intervalında dəyişir, yəni hər qiyməti ala bilər. Digər tərəfdən, kristal qəfəsdə onun qiyməti $q_{\max} = \pi/a$ olduğundan $\lambda_{\min} = 2\pi/q_{\max} = 2a$ olur, yəni qəfəsdə uzunluğu $2a$ -dan kiçik olan dalğa yayıla bilməz.

2. (5.11.7) bərabərliyindən görüldüyü kimi, teldə yaranan dalğaların faza sürəti $v_\phi = \omega/q = v_0$ və qrup sürəti $v_g = d\omega/dq = v_0$ eynidir. Birölçülü qəfəslərdə yayılan dalğalarda isə v_ϕ ilə v_g yalnız $q \rightarrow 0$ limit halında eyni olur.



Şəkil 5.12. Faza və qrup sürətlərinin dalğa ədədindən asılılığı

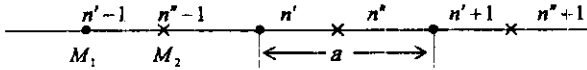
Birölçülü qəfəsdə yayılan dalğaların faza və qrup sürətləri üçün (5.11.10) və (5.11.14) bərabərliklərindən

$$v_{\phi} = \frac{\omega(q)}{q} = a \sqrt{\frac{\beta}{M}} \left| \frac{\sin \frac{aq}{2}}{\frac{aq}{2}} \right| = v_0 \left| \frac{\sin \frac{aq}{2}}{\frac{aq}{2}} \right| \quad (5.11.20)$$

$$v_{gr} = \frac{d\omega(q)}{dq} = v_0 \left| \cos \frac{aq}{2} \right| \quad (5.11.21)$$

ifadələri alınır. Faza və qrup sürətlərinin q dalğa ədədindən asılılığı şəkil 5.12-də göstərilmişdir. Buradan $q \rightarrow 0$ limitində, $v_{\phi} = v_{gr} = v_0$ olduğu aydındır.

Birölçülü müəkkəb qəfəs. Yuxarıda təyin edildiyi kimi bir çox maddələr Brave qəfəslərində kristallaşmırlar: misal olaraq NaCl, CsCl, Ge, Si və s. kimi kristall qəfəslərin bazis özəyində iki atom və ya ion vardır. Burada belə kristalların birölçülü halına baxaq. Fərz edək ki, birölçülü qəfəs kütlələri M_1 və M_2 olan atomlar və ya ionlardan ibarətdir (şəkil 5.13).



Şəkil 5.13. Birölçülü müəkkəb qəfəsdə atomların rəqsi

Bu halda bazis özəklərinin «həcmi» $\Omega = a$ olur və bu «həcmdə» iki atom vardır. Birölçülü sadə qəfəs halında olduğu kimi, atomlar arasındakı qüvvələrin kvazielastik olduğu fərziyyəsini qəbul edək və yalnız ən yaxın qonşular arasındakı qarşılıqlı təsiri nəzərə alaq. Əgər n' atomu ilə n'' atomu arasındakı elastiklik sabiti β_1 , n' ilə $n''-1$ və n'' ilə $n'+1$ atomları arasındakı elastiklik sabiti β_2 ilə işarə edilərsə, hərəkət tənlikləri aşağıdakı kimi olar:

$$M_1 \frac{d^2 u_n'}{dt^2} = -\beta_1 (u_n' - u_n'') - \beta_2 (u_n' - u_{n'-1}') \quad (5.11.22)$$

$$M_2 \frac{d^2 u_n''}{dt^2} = -\beta_1 (u_n'' - u_n') - \beta_2 (u_n'' - u_{n'+1}'')$$

Burada $u_n'(t)$ və $u_n''(t)$ funksiyaları n -ci elementar özəkdəki n' və n'' atomlarının yerdəyişmələridir. Bu funksiyaları (5.11.8) bərabərliyinə uyğun olaraq:

$$u_n'(t) = A_1 e^{i(qan - \omega t)}, \quad u_n''(t) = A_2 e^{i(qan - \omega t)} \quad (5.11.23)$$

şəkilində yazıla bilər. Burada A_1 və A_2 -rəqs amplitudlarıdır və $A_1 = A_2$.

(5.11.23) funksiyasını (5.11.22) tənliklər sistemində yerinə yazıb bu tənliklərin hər iki tərəfini $\exp i[qan - \omega t]$ -yə bölsək, A_1 və A_2 amplitudları üçün

$$\begin{aligned} [M_1 \omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]A_1 + (\beta_1 + \beta_2 e^{-iaq})A_2 &= 0 \\ (\beta_1 + \beta_2 e^{-iaq})A_1 + [M_2 \omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)]A_2 &= 0 \end{aligned} \quad (5.11.24)$$

tənlikləri əldə edilir. Bu biricins tənliklər sisteminin sıfırdan fərqli ($A_1 \neq 0$ və $A_2 \neq 0$) həlli olması üçün

$$\begin{vmatrix} M_1 \omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) & \beta_1 + \beta_2 \exp(-iaq) \\ \beta_1 + \beta_2 \exp(iaq) & M_2 \omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \end{vmatrix} = 0 \quad (5.11.25)$$

xarakterik tənlik ödənilməlidir, yəni əmsallardan düzələn determinant sıfır olmalıdır. (5.11.25) bərabərliyi ω^2 -na görə kvadratikdir və mümkün olan bütün tezlikləri təyin edir. $e^{iaq} + e^{-iaq} = 2 \cos(aq)$ və $1 - \cos(aq) = 2 \sin^2(aq/2)$ olduğunu nəzərə alsaq, (5.11.25) tənliyi

$$\omega^4 - \omega_0^2 \omega^2 + 4 \left(\frac{\beta_1 \beta_2}{M_1 M_2} \right) \sin^2 \frac{aq}{2} = 0 \quad (5.11.26)$$

şəklinə düşür, burada

$$\omega_0^2 = \frac{(M_1 + M_2)(\beta_1 + \beta_2)}{M_1 M_2} \quad (5.11.27)$$

(5.11.26) tənliyindən tezlik üçün iki müxtəlif kök alınır.

$$\begin{aligned} \omega_1^2 &= \frac{1}{2} \omega_0^2 \left[1 - \sqrt{1 - \gamma_0^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right] \\ \omega_2^2 &= \frac{1}{2} \omega_0^2 \left[1 + \sqrt{1 - \gamma_0^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right] \end{aligned} \quad (5.11.28)$$

Burada γ_0 - qəfəsdəki atomların kütlələrindən və elastik sabitlərdən aslı bir parametrdir və ən böyük qiyməti vahiddir:

$$\gamma_0^2 = 16 \frac{\beta_1 \beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} \cdot \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (5.11.29)$$

$\beta_1 = \beta_2$ və $M_1 = M_2$ üçün $\gamma_0^2 = 1$ və ω^2 ən böyük qiymətini alır: bütün əks hallarda $\gamma_0^2 < 1$ və yaxud $\gamma_0^2 \sin^2 \frac{aq}{2} < 1$ olur. Beləliklə, (5.11.28)

bərabərlikləri ilə ifadə olunan ω_1 və ω_2 tezlikləri həqiqidir.

İndi (5.11.28) tezliklərini araşdıraraq. Əgər (5.11.23) yerdəyişmə ifadələrində q yerinə $q' = q + (2\pi/a)g$ yazsaq ($g = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) u_n' və u_n'' funksiyaları dəyişməz, yəni q və $q' = q + (2\pi/a)g$ dalğa ədədləri eyniqiymətlidir. Bundan başqa, (5.11.28) sistemindən görüldüyü kimi, $\omega_1(q)$ və $\omega_2(q)$ periodu $2\pi/a$ olan periodik funksiyalardır:

$$\omega_j(q) = \omega_j(q + b_g), \quad j = 1, 2. \quad (5.11.30)$$

Burada $b_g = \frac{2\pi}{a}g$ - tərs qeş vektorudur. Beləliklə, q üçün asılı olmayan qiymətlər aralığı olaraq:

$$-\frac{\pi}{a} \leq q \leq +\frac{\pi}{a} \quad (5.11.30a)$$

seçilə bilər və $\omega_j(q)$ asılılıqlarını (5.30a) birinci Brillüen zonası daxilində təhlil etmək kifayətdir. Sonralar görəcəyimiz kimi müəyyən səbəbdən **dairəvi ω_1 tezliyi akustik, ω_2 tezliyi isə optik tezlik adlanır və $\omega_1(q) \approx \omega_{ak}(q)$, $\omega_2 = \omega_{op}(q)$ kimi göstərilir.**

Tezliklərin birinci Brillüen zonasının mərkəzində və sərhədlərində aldığı qiymətləri (5.11.28)-dən tapa bilərik:

$$\omega_{ak}(0) = 0; \quad \omega_{ak}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}}\left(1 - \sqrt{1 - \gamma_0^2}\right)^{1/2} \quad (5.11.31)$$

$$\omega_{op}(0) = \omega_0; \quad \omega_{op}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}}\left(1 + \sqrt{1 - \gamma_0^2}\right)^{1/2}$$

Buradan görüldüyü kimi, tezliklərin limit qiymətləri arasında

$$\omega_{ak}(0) < \omega_{ak}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) < \omega_{op}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) < \omega_{op}(0) \quad (5.11.32)$$

bərabərsizlikləri vardır. Xüsusi halda $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ olarsa,

$$\omega_0 = \left[2\beta\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)\right]^{1/2}, \quad \gamma_0 = \frac{2}{M_1 + M_2}(M_1 M_2)^{1/2}$$

olur. Əgər $M_1 \gg M_2$ olarsa, akustik və optik tezliklərinin Brillüen zonası sərhədlərində qiymətləri

$$\omega_{ak}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) = \left(\frac{2\beta}{M_1}\right)^{1/2}; \quad \omega_{op}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) = \left(\frac{2\beta}{M_2}\right)^{1/2} \quad (5.11.31a)$$

olar.

Uzun dalğalar ($\lambda \gg a$), yeni kiçikdalğa ədədləri ($aq \ll 1$) üçün $\sin(aq/2) \approx aq/2$ olar və (5.11.28) bərabərliyindən:

$$\omega_{ak}(q \rightarrow 0) = \frac{1}{4}\omega_0\gamma_0 aq \sim q; \quad (5.11.33)$$

$$\omega_{op}(q \rightarrow 0) = \omega_0\left(1 - \frac{\gamma_0^2 a^2}{32} q^2\right)$$

alınır. Bundan başqa, (5.11.28) bərabərliyindən görüldüyü kimi, $\omega_{ak}(q)$ və $\omega_{op}(q)$ asılılıqları $q=0$ nöqtəsinə görə simmetrikdir, yəni

$$\omega_{ak}(q) = \omega_{ak}(-q), \quad \omega_{op}(q) = \omega_{op}(-q)$$

və onların $q = \pm\pi/a$ nöqtələrindəki törəmələri ($\gamma_0 < 1$ üçün) sıfırdır:

$$\left(\frac{d\omega_{ak}}{dq}\right)_{q=\pm\pi/a} = 0 \quad \left(\frac{d\omega_{op}}{dq}\right)_{q=\pm\pi/a} = 0 \quad (5.11.35)$$

Beləliklə, rəqs tezliklərinin (5.11.30)-(5.11.35) xassələrini nəzərə alaraq $\omega_{\text{ak}}(q)$ və $\omega_{\text{opt}}(q)$ asılılıqlarını sxematik olaraq çəkmə bilirik (şəkil 5.14).

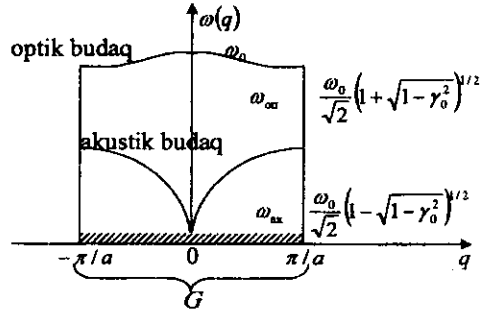
Bu şəkiləki $\omega_{\text{ak}}(q)$ və $\omega_{\text{opt}}(q)$ əyriləri uyğun olaraq akustik budaq və optik budaq adlanır.

Birinci Brillüen zonasında $-\pi/a \leq q \leq \pi/a$ aralığında q dalğa ədədi neçə qiymət alır? Bu suala cavab vermək üçün Born-Karmanın (5.11.17) dövrü ifadəsindən istifadə edək. Bu şərti (5.11.23) yerdəyişmə

ifadələrində istifadə etsək, q dalğa ədədinin (5.11.18) ilə verilən qiymətləri aldığı görünür:

$$-\pi/a \leq q \leq \pi/a$$

aralığında dalğa ədədinin aldığı qiymətlərin sayı kristalların bazis özəklərinin sayına (G) bərabərdir (şəkil 5.14). Dalğa ədədinin hər bir qiymətinə iki tezlik uyğun gəldiyindən, mümkün olan tezliklərin ümumi sayı qəfəsin sərbəstlik dərəcələrinin sayına ($N=2G$) bərabərdir.



Şəkil 5.14. Birölçülü mürəkkəb qəfəsdə rəqs tezliklərinin optik və akustik budaqlarının dalğa ədədindən asılılığı

Birölçülü mürəkkəb qəfəsdə mümkün olan tezliklərin ümumi sayı kristalın sərbəstlik dərəcələrinin sayına bərabərdir.

İndi akustik və optik tezlikli rəqslər zamanı bazis özəkdəki M_1 və M_2 atomlarının necə hərəkət etdiklərini araşdıraq. (5.11.23) və (5.11.24) bərabərliklərində atomların yerdəyişmələrinin nisbətleri:

$$\frac{u'_n}{u''_n} = \frac{A_1}{A_2} = \frac{\beta_1 + \beta_2 \exp(-iaq)}{(\beta_1 + \beta_2) - M_1 \omega^2} \quad (5.11.37)$$

kimidir. Bu nisbətə uzun dalğalar $\lambda \gg a$ ($aq \ll 1$) limitində baxaq. Bu ifadədə $\exp(-iaq) = 1$ olduğunu və tezliklərin (5.11.27) və (5.11.31) limit qiymətlərini nəzərə alsaq,

$$\left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{q \rightarrow 0}^{\text{ak}} = +1; \quad \left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{q \rightarrow 0}^{\text{opt}} = -\frac{M_2}{M_1} \quad (5.11.38)$$

olar.

Ən kiçik dalğa uzunluğu $\lambda = 2a$ (yəni $q = \pi/a$) halında $\exp(-iaq) = \exp(-i\pi) = -1$ olduğunu və (5.11.27), (5.11.31) ifadələrini nəzərə alsaq, (5.11.37) bərabərliyi aşağıdakı formaya düşür:

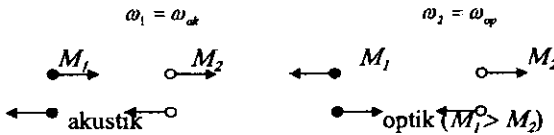
$$\left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{q \rightarrow \pm \pi / a}^{\text{ak}} = \frac{(\beta_1 - \beta_2) / (\beta_1 + \beta_2)}{1 - \frac{(M_1 + M_2)}{2M_2} \left[1 \mp \left(1 - \frac{16\beta_1\beta_2}{(\beta_1 + \beta_2)^2} \frac{M_1 M_2}{(M_1 - M_2)^2} \right)^{1/2} \right]} \quad (5.11.39)$$

Bu ifadədə kökün qarşısındakı mənfi işarəsi akustik budaqa, müsbət işarəsi isə optik budağa uyğundur. Xüsusi halda $\beta_1 \gg \beta_2$ və $M_1 = M_2$ olarsa, (5.11.39) bərabərliyindən:

$$\left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{q \rightarrow \pm \pi / a}^{\text{ak}} = +1; \quad \left(\frac{u'_n}{u''_n} \right)_{q \rightarrow \pm \pi / a}^{\text{op}} = -1 \quad (5.11.40)$$

əldə edilir.

(5.11.38) və (5.11.40) şərtlərindən görünür ki, akustik rəqslər zamanı bazis özəkdəki atomlar eyni fazada, optik rəqslərdə isə bu atomlar əks fazada hərəkət edirlər (şəkil 5.15).



Şəkil 5.15. Kristallik qəfəsdə optik və akustik budaqlara uyğun rəqslər

Optik rəqslərdə $u'_n M_1 + u''_n M_2 = 0$ bərabərliyi saxlanır, yəni rəqs zamanı özəyin kütlə mərkəzi sabit qalır və atomlar bir-birinə nəzərən rəqsi hərəkət edirlər. Akustik rəqslərdə isə elementar özəyin kütlə mərkəzi rəqs edir (şəkil 5.15).

Əgər qəfəsi təşkil edən zərrəciklər ionlardırsa (NaCl-da olduğu kimi), ω_2 tezlikli optik rəqslər zamanı ionlar arasındakı məsafə (R) periodik olaraq dəyişir və, beləliklə, özəyin elektrik dipol momenti ($p = eR$) də bu tezliklə dəyişir. Bunun nəticəsində kristalda elektromaqnit dalğaları yayılır. Buna görə də, ω_2 tezliyi və ona uyğun olan $\omega_2(q) = \omega_{op}(q)$ dispersiya münasibəti optik budaq adlanır.

İon kristallarda ω_{op} tezlikli rəqslərə uyğun tezlikli elektromaqnit dalğaları qarşı qoya bilərik. Bunu göstərmək üçün fərz edək ki, elektrik yükləri $\pm e$ olan ionlardan təşkil edilmiş ion kristala dəyişən $E = E_0 e^{i\omega t}$ elektrik sahəsi təsir edir. Onda kristall qəfəsdəki ionlara $\pm eE$ kimi qüvvə təsir edir. Bu qüvvəni nəzərə alsaq və $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ qəbul etsək, ionların (5.11.22) hərəkət tənlikləri uzun dalğalar ($q \rightarrow 0$) limitində yazılırsa, A_1 və A_2 rəqs amplitudları üçün:

$$M_1 \omega^2 A_1 = 2\beta(A_1 - A_2) - eE_0 \quad (5.11.40a)$$

$$M_2 \omega^2 A_2 = 2\beta(A_2 - A_1) + eE_0$$

tənliklər sistemi əldə edilir. Uzun dalğalı optik dalğalar ($q \rightarrow 0$) halı üçün amplitudların nisbəti $A_1/A_2 = -M_1/M_2$ olduğundan, (5.11.40a) tənliklər sistemindən:

$$A_1 = -\frac{(e/M_1)}{\omega^2 - \omega_0^2} E_0; \quad A_2 = -\frac{(e/M_2)}{\omega^2 - \omega_0^2} E_0; \quad (5.11.40b)$$

alınır. Burada $\omega_0 = [2\beta(1/M_1 + 1/M_2)]^{1/2}$ - optik rəqslərin uzun dalğa boyu limitdəki məxsusi tezliyidir (5.11.27). Amplitudların (5.11.40b) ifadəsindən aydın görüldüyü kimi xarici elektrik intensivliyinin tezliyi ion kristalın məxsusi ω_0 tezliyinə yaxın olduğu zaman ($\omega \approx \omega_0$), rəqs amplitudları kəskin artır, yəni elektromaqnit sahəsində kristala böyük miqdarda enerji daxil olur və kristalda optik rəqslər yaranır (infraqırmızı udma). Beləliklə, ω_2 tezliklərinə hansı səbəbdən optik tezliklər deyildiyi aydın olur. Kristalın ω_0 məxsusi tezliyini qiymətləndirək. Səs dalğalarının yayılma sürəti v_0 ilə elastiklik sabiti β arasında (5.11.14) ifadəsi vardır. Buradan alınan $\beta = Mv_0^2/a_2$ qiymətini $\omega = [2\beta(1/M_1 + 1/M_2)]^{1/2}$ ifadəsində yerinə yazsaq və $M_1 \approx M_2$ qəbul etsək,

$$\omega_0 \approx 2 \frac{v_0}{a} \approx \frac{5 \cdot 10^5}{10^{-8}} \text{ san}^{-1} \approx 10^{14} \text{ san}^{-1}$$

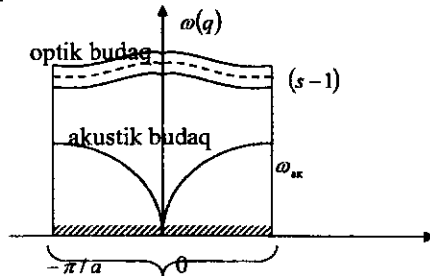
alırıq. $\omega = 10^{14} \text{ san}^{-1}$ tezliyi elktromaqnit spektrin infraqırmızı zonasına düşdüyündən ion kristallar infraqırmızı elktromaqnit dalğalarını udar və nəticədə kristalda optik rəqslər yaranır.

İndi tutaq ki, birölçülü qəfəsin «həcmi» $\Omega = a$ olan bazis özəyində s sayda atom var. Belə bir qəfəs üçün hərəkət tənliklərinin sayı ((5.11.22)-dən fərqli olaraq) s olacaq və buna uyğun olaraq tezliklər üçün (5.11.26) xarakterik tənliyinin əvəzinə ω^2 -na görə s -ci dərəcədən bir tənlik əldə edirik. Prinsipcə bu tənlikdən s sayda

$$\omega_1(q), \omega_2(q), \omega_3(q), \dots, \omega_s(q) \quad (5.41)$$

tezlikləri alınır. Bu tezliklərdən biri bazis özəyinin kütlə mərkəzinin rəqsinə (akustik budaq), yerdə qalan $(s-1)$ sayda tezlik isə atomların bir-birinə nəzərən nisbi hərəkətlərinə qarşı qoyulur (optik rəqslər) (şəkil 5.16).

Bu halda $-\pi/a \leq q \leq \pi/a$ aralığında, dalğa ədədinin aldığı qiymətlərin sayı qəfəs-



Şəkil 5.16. Kristalda bazis özəyinin kütlə mərkəzinin rəqsinə (akustik budaq) və atomların bir-birinə nəzərən rəqslərinə (optik budaq) uyğun tezliklərin dalğa ədədindən asılılığı

deki bazis özeklərin (G) sayına bərabər olduğundan və q -nun hər bir qiymətinə qarşı s sayda tezlik qoyulduğundan tezliklərin ümumi sayı qəfəsin sərbəstlik dərəcəsinin sG sayına bərabər olur. Yəni bu hal üçün də (5.11.36) nəticəsi saxlanılır.

Üçölçümlü qəfəslər. Fərz edək ki, bazis qəfəsinin həcmi $\Omega_0 = \bar{a}_1(\bar{a}_2 \times \bar{a}_3)$ olan üçölçümlü hər bir elementar özekdə s sayda müxtəlif növ atom vardır. Kristal daxilində tərəfləri Ga_1, Ga_2, Ga_3 vektorları ilə təyin edilən paralelepiped şəklində bir oblast seçək. Burada G - çox böyük tam ədəddir. Bu mikroskopik oblastın həcmi $V = G^3 \Omega_0 = N \Omega_0$ və $N = G^3$ götürülmüş oblastın bazis özeklərinin sayıdır. Beləliklə, kristalın baxdığımız oblastdakı atomların sayı $3sN$ -dir.

Kristal qəfəsdə hər bir atomun koordinatı

$$\vec{r}_n^k = \bar{a}_n + \vec{r}^k \quad (5.11.42)$$

radius vektoru ilə təyin edilir. Burada $\bar{a}_n = n_1 \bar{a}_1 + n_2 \bar{a}_2 + n_3 \bar{a}_3$ - n -ci bazis özəyinin koordinatını təyin edən qəfəs vektoru, \vec{r}^k bazis özek daxilindəki k nömrəli atomun koordinatını göstərir. Buna görə \vec{r}_n^k vekturu n -ci özekdəki k nömrəli atomun koordinatını təyin edən radius vektordur.

Rəqs zamanı atmosferin sükunət koordinatları dəyişir. n -ci qəfəsdəki k nömrəli atomun yerdəyişmə vektorunu

$$u_{na}^k = (y), \quad n=1,2,3,\dots,N; \quad k=1,2,3,\dots,s; \quad \alpha = x, y, z. \quad (5.11.43)$$

ilə göstərek. Rəqs edən qəfəsin U potensial enerjisi $3sN$ sayda u_{na}^k yerdəyişmələrin funksiyasıdır:

$$U(u_{na}^k) = U(u_{1x}^1, u_{1y}^1, u_{1z}^1, \dots, u_{Nx}^s, u_{Ny}^s, u_{Nz}^s) \quad (5.11.44)$$

Sükunətdə ($u_{na}^k = 0$) $U = -U_0$ minimumdur. Buna görə

$$\left(\frac{\partial U}{\partial u_{na}^k} \right) = 0 \quad (5.11.45)$$

olmalıdır.

Kiçik yerdəyişmələr üçün $U(u_{na}^k)$ potensial enerji funksiyasının yerdəyişmələrin üstlərinə görə sıraya ayırır, kvadratik hədlə kifayətlənsək (harmonik yaxınlaşmada),

$$U = -U_0 + \frac{1}{2} \sum_{n\alpha k\alpha\beta} U_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k & k' \\ n & n' \end{pmatrix} u_{na}^k u_{n'\beta}^{k'} \quad (5.11.46)$$

aralıq. Burada

$$U_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} kk' \\ nn' \end{pmatrix} = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_{na}^k \partial u_{n'\beta}^{k'}} \right)_0 \quad (5.11.47)$$

sabit kəmiyyətdir. Potensial enerjinin (5.11.46) ifadəsindən \vec{r}_n^k atomuna təsir edən qüvvənin α proyeksiyası üçün

$$F_{na}^k = -\frac{\partial U}{\partial u_{na}^k} = -\sum_{n'k'\beta} U_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} kk' \\ nn' \end{pmatrix} u_{n'\beta}^{k'} \quad (5.11.48)$$

alınır. Beləliklə, harmonik yaxınlaşma çevrəsində (5.48) asılılığından istifadə edərək, kütləsi M_k olan və n -ci özəkdə yerləşmiş k nömrəli atomun yerdəyişməsinin α proyeksiyası üçün klassik hərəkət tənliyini yaza bilərik:

$$M_k \frac{\partial u_{na}^k}{\partial t^2} = - \sum_{n'k'} U_{\alpha\beta} \left(\frac{kk'}{m_1} \right) u_{n'a'}^{k'} \quad (5.11.49)$$

(5.11.49) tənliklər sistemi $3sN$ sayda $u_{na}^k(t)$ yerdəyişmələri üçün yazılmış differensial tənliklərdən ibarətdir. Bu sistemin həlli, (5.11.23) ifadəsinə oxşar olaraq

$$u_{na}^k(t) = A_\alpha^k(\vec{q}) e^{i(\vec{q}\vec{a}_n - \omega t)} \quad (5.11.50)$$

şəklində axtarılır. Burada A_α^k əmsali $k = 1, 2, 3, \dots, s$ atomlarının hər biri üçün fərqli olan amplitudlarıdır, \vec{q} - dalğa vektoru, \vec{a}_n - qəfəs vektoru, ω - tezlikdir. (5.11.50) ifadəsini (5.11.49) tənliklər sisteminə yazıb bərabərliklərin hər iki tərəfini $e^{i(\vec{q}\vec{a}_n - \omega t)}$ vurduğuna bəlsək, A_α^k amplitudları üçün aşağıdakı bircins tənliklər sistemi

$$M_k \omega^2(\vec{q}) A_\alpha^k(\vec{q}) = \sum_{k'\beta} D_{\alpha\beta}^{kk'}(\vec{q}) A_{\beta}^{k'}(\vec{q}) \quad (5.11.51)$$

alırıq. Burada

$$D_{\alpha\beta}^{kk'}(\vec{q}) = \sum_n U_{\alpha\beta} \left(\begin{matrix} k & k' \\ n & n' \end{matrix} \right) e^{i\vec{q}(\vec{a}_n - \vec{a}_{n'})} \quad (5.11.52)$$

kristalın dinamik matrisidir. (5.11.51) tənliklər sistemi

$$\sum_{k'\beta} [D_{\alpha\beta}^{kk'}(\vec{q}) - M_k \omega^2(\vec{q}) \delta_{\alpha\beta}] A_{\beta}^{k'}(\vec{q}) = 0 \quad (5.11.53)$$

şəklində yazıla bilər. Burada $\delta_{\alpha\alpha}$ və $\delta_{\alpha\beta}$ Kroneker simvollarıdır və indeksləri eyni olduqda 1, indeksləri fərqli olduqda 0 (sıfır) qiymətini alır. Amplitudlar üçün yazılan (5.11.53) bircins tənlik sisteminin sıfırdan fərqli olması üçün əmsallardan təşkil olunmuş xarakteristik tənlik ödənməlidir. Bu xarakteristik tənlik determinant şəklində yazıla bilər:

$$\begin{vmatrix} D_{xx}^{11} - M_1 \omega^2 & D_{xy}^{11} & D_{xz}^{11} & D_{xx}^{12} & \dots & D_{xz}^{1s} \\ D_{yx}^{11} & D_{yy}^{11} - M_1 \omega^2 & D_{yz}^{11} & D_{yx}^{12} & \dots & D_{yz}^{1s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{zx}^{11} & D_{zy}^{11} & D_{zz}^{11} & D_{zx}^{12} & \dots & D_{zz}^{1s} - M_1 \omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (5.11.54)$$

Bu işə ω^2 -na görə $3s$ dərəcəli bir tənlikdir. Prinsipcə, (5.54) tənliyinin $3s$ sayda həlli olmalıdır:

$$\omega_1(\vec{q}), \omega_2(\vec{q}), \omega_3(\vec{q}), \dots, \omega_{3s}(\vec{q}). \quad (5.11.55)$$

$\omega_j(\vec{q}), j = 1, 2, \dots, 3s$ funksiyalarının hər biri \vec{q} istiqamətində bir rəqs budağını təsvir edir. Bu budaqlar üst-üstə düşə və ya kəsişə bilərlər. $\omega_j(\vec{q})$

tezliklərin, yəni dispersiya münasibətlərinin açıq şəklini təyin etmək üçün $D_{\alpha\beta}^{kk'}(\bar{q})$ dinamik matrisinin açıq şəklini bilmək və (5.11.54) tənliyini həll etmək lazımdır. Ümumi şəkildə bu məsələni həll etmək çətindir. Burada biz $\omega_j(\bar{q})$ dispersiya münasibətlərinin yalnız ümumi xassələrini araşdıraraq (5.11.47)-dən

$$U_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} k & k' \\ n & n' \end{pmatrix} = U_{\beta\alpha} \begin{pmatrix} k' & k \\ n' & n \end{pmatrix} \quad (5.11.56)$$

olduğu aydın görünür. Bunu nəzərə alsaq, (5.11.52) bərabərliyindən dinamik matrisin bir ermit matris olduğu aydın olur:

$$(D_{\alpha\beta}^{kk'}(\bar{q})) = (D_{\beta\alpha}^{k'k}(\bar{q})) \quad (5.11.57)$$

(5.52) bərabərliyindən eyni zamanda çıxır ki,

$$(D_{\alpha\beta}^{kk'}(-\bar{q})) = (D_{\alpha\beta}^{kk'}(\bar{q})) \quad (5.11.58)$$

yəni dinamik matris simmetrikdir. Dinamik matrisin ermit olduğunu və (5.11.58) xassəsini nəzərə alsaq, (5.11.54) tənliyinin köklərinin

$$\omega_j(-\bar{q}) = \omega_j(\bar{q}), \quad j = 1, 2, 3, \dots, 3s \quad (5.11.59)$$

xassəsinə malik olduğu görünür. Buna görə, \bar{q} fəzasında izotezlik səthi $\omega_j(\bar{q}) = \text{const}$ inversiya mərkəzinə malikdir.

Rəqs tezliyinin dispersiya asılılıqlarının ikinci əsas xassəsini aydınlaşdırmaq üçün (5.11.50) yerdəyişməsindəki \bar{q} dalğa vektorunu

$$\bar{q} \Rightarrow \bar{q}' = \bar{q} + \bar{b}_g \quad (5.11.60)$$

şəklində təyin edilən \bar{q}' vektoru ilə əvəz edək. Burada $\bar{b}_g = g_1 \bar{b}_1 + g_2 \bar{b}_2 + g_3 \bar{b}_3$ -ixtiyari tərs qəfəs vektorudur. Bu halda

$$\bar{q}' \bar{a}_n = (\bar{q} + \bar{b}_g) \bar{a}_n = \bar{q} \bar{a}_n + 2\pi(n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3) = \bar{q} \bar{a}_n + 2\pi k$$

(k -hər hansı bir tam ədəddir) və $\exp(i2\pi k) = 1$ olduğunu nəzərə alsaq, (5.11.50) yerdəyişmənin dəyişmədiyi görünür:

$$u_{na}^k(\bar{q}) = u_{na}^k(\bar{q} + \bar{b}_g). \quad (5.11.61)$$

Yəni \bar{q} fəzasında \bar{q} və $\bar{q} + \bar{b}_g$ nöqtələri ekvivalentdirlər. Buna görə də \bar{q} dalğa vektorundan asılı olan bütün fiziki kəmiyyətlər, xüsusi halda tezliklər \bar{q} və $\bar{q} + \bar{b}_g$ nöqtələrində eyni olmalıdır.

$$\omega_j(\bar{q}) = \omega_j(\bar{q} + \bar{b}_g). \quad (5.11.62)$$

Başqa sözlə, $\omega_j(\bar{q})$ tezlikləri q fəzasında periodik funksiyalardır. \bar{q} və $\bar{q} + \bar{b}_g = \bar{q}'$ nöqtələrinin ekvivalent olması ilə əlaqədar \bar{q} dalğa vektorunu sonlu bir aralıqda təyin etmək kifayətdir. $\bar{a}_n = \bar{a}$, və $\bar{b}_g = \bar{b}_i$ seçsək, $(\bar{q}' \bar{a}_i) = (\bar{q} + \bar{b}_g) \bar{a}_i = \bar{q} \bar{a}_i + 2\pi$ alarıq. Yəni $\bar{q} \bar{a}_i$ skalyar hasili 2π aralığında qiymətlər alır. Biz bu aralığı

$$-\pi \leq \bar{q} \bar{a}_i \leq +\pi \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.11.63)$$

şəklində seçək. Verilmiş kristall qəfəs üçün $\vec{q}\vec{a}$ hasilinin 2π aralığında dəyişdiyi tərs qəfəs oblastı **Brillyüen zonası** adlanır.

Beləliklə, ω , tezliklərini $-\pi \leq \vec{q}\vec{a}_i \leq +\pi$ aralığında araşdırmaq kifayətdir, çünki bu aralıq xaricində olan hər bir \vec{q} vektorunu \vec{b}_i vektoru əlavə etməklə bu aralıq daxilinə gətirmək olar.

Kubik kristallar üçün Dekart koordinat sistemində (5.11.63) zonası (birinci Brillyüen zonası)

$$-\frac{\pi}{a} \leq q_\alpha \leq +\frac{\pi}{a}; \quad \alpha = x, y, z \quad (5.11.64)$$

kimi təyin edilir, burada a - kubik kristalın qəfəs sabitidir.

Göstərmək olar ki, dalğa vektorunun kiçik qiymətləri üçün (5.11.55) dispersiya asılılıqları aşağıdakı xassələrə malikdir: $\vec{q} \rightarrow 0$ limitində $3s$ sayda tezlikdən yalnız üçü sıfıra yaxınlaşır:

$$\omega_j(\vec{q} \rightarrow 0) = 0 \quad (j = 1, 2, 3) \quad (5.11.65)$$

və bu tezlikli rəqslər zamanı bazis özəyindəki atomların hamısının yerdəyişməsi eyni olur, yəni özək bütün olaraq rəqs edir (akustik rəqslər). Yerdə qalan $(3s - 3)$ sayda tezliklərin hər biri isə $q \rightarrow 0$ limitində sonlu bir qiymətə yaxınlaşırlar:

$$\omega_j(\vec{q} \rightarrow 0) = \omega_{qj}; \quad (j = 4, 5, \dots, 3s) \quad (5.11.66)$$

Bu tezliklər özəkdəki atomların bir-birinə nisbətən rəqslərinə uyğundur və bu cür rəqs zamanı özəyin kütlə mərkəzi hərəkətsiz qalır (optik rəqslər). Bir ölçülü qəfəslər üçün bu şərt (5.38) bərabərliyində göstərilmişdir.

Yuxarıda \vec{q} dalğa vektorunun asılı olmayan qiymətlərinin birinci Brillyüen zonası daxilində olduğunu göstərmişdik. İndi birinci Brillyüen zonasında, \vec{q} -nün neçə və hansı qiymətləri aldığı tapanıq. Bunun üçün (5.11.50) yerdəyişmənin ifadəsində Born-Karman bərabərliyindən istifadə edək. Üçölçülü qəfəsdə bu şərt

$$u(\vec{a}_n) = u(\vec{a}_n + G\vec{a}_i); \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.11.67)$$

şəklindədir. Burada G - çox böyük tam ədəddir. Yerdəyişmə ifadəsinin (5.11.67) şərtini ödəməsi üçün $\exp[i\vec{q}G\vec{a}_i] = 1$ olmalıdır, yəni $G\vec{q}\vec{a}_i = 2\pi g_i$ və ya:

$$\vec{q}\vec{a}_i = \frac{2\pi}{G} g_i, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (5.11.68)$$

olmalıdır, burada g_i - tam ədədlərdir. (5.11.68) ifadəsini (5.11.63)-də yerinə yazsaq, g kəmiyyətinin dəyişmə aralığı:

$$-\frac{G}{2} \leq g_i \leq +\frac{G}{2} \quad (5.11.69)$$

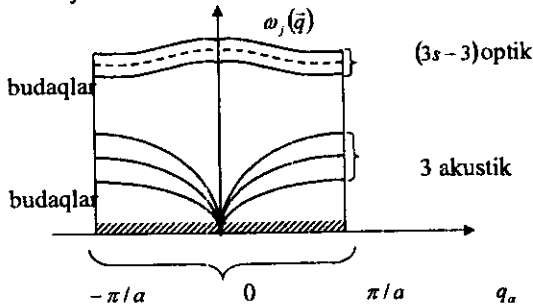
belə təyin edilir. Beləliklə, \vec{q} vektorunun \vec{a}_i vektoru üzərindəki proyeksiyası (5.11.68) G sayda bir-birinə çox yaxın kəsilməz qiymətlər

alır. Buna görə $\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$ oxlarını da nəzərə alsaq, (5.11.63) aralığında, \bar{q} vektoru $G^3 = N$ sayda qiymət alır. Burada N - kristaldakı bazis özəklərinin sayıdır.

\bar{q} dalğa vektorunun bir qiymətinə $3s$ sayda tezlik uyğun olduğundan, tezlik spektrinin təşkil edən tezliklərin sayı sonludur və $3sN$ -dir. Bu say eyni zamanda kristalın sərbəstlik dərəcələrinin sayına ($3sN$) bərabərdir. Beləliklə, əldə edilən ən ümumi və mühüm nəticə budur:

Kristalda mümkün olan tezliklərin sayı, kristalın sərbəstlik dərəcələrinin sayına bərabərdir.

Şəkil 5.17-də göstərilən tezlik spektri kristalın istilik rəqsləri ilə təyin olunan bütün xassələrinin əsasını təşkil edir. Üçölçülü qəfəsin tezlik spektri sonlu sayda ($3sN$) tezlikdən ibarətdir və bunlar da $3s$ sayda budaq təşkil edirlər (şəkil 5.17). Bu budaqların yalnız üçü akustik, yerdə qalan ($3s-3$) dənəsi isə optik budaqdır. Akustik budaqların sayı bazis özəkdə olan atomların sayından (s -dən) asılı deyildir, çünki özək nə qədər müəkkəb olursa olsun, onun bir kütlə mərkəzi vardır. Bazis özəkdə yalnız bir atom varsa ($s=1$), yəni Brave qəfəsləri halında kristalda optik rəqslər mümkün deyil.



Şəkil 5.17. Kristalın istilik rəqslərinin tezlik spektri

§ 5.12. Normal koordinatlar. Kristal qəfəsin Hamilton funksiyası

İndi rəqsi hərəkətdə olan qəfəsin tam enerjisini, yəni Hamilton funksiyasını tapmaq. Kristalın tam enerjisi E kinetik K və potensial U enerjilərinin cəminə bərabərdir:

$$E = K + U \quad (5.12.1)$$

Bu məsələni əvvəlcə birölçülü sadə qəfəs (şəkil 5.10) üçün həll edək, sonra isə üçölçülü qəfəs halına ümumləşdirək. Şəkil 5.10-də göstərilən birölçülü sadə qəfəs üçün K və U -nün ifadələri aşağıdakı kimi olar:

$$K = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^G \dot{u}_n^2, \quad (5.12.2)$$

$$U = \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^G (u_n - u_{n-1})^2. \quad (5.12.3)$$

Burada G - qəfəsin fundamental oblastında olan elementar bazis özeklərinin (bizim halda, həm də atomların) sayı, \dot{u}_n - yerdəyişmənin zamana görə törəməsidir. Potensial enerji U - nun ifadəsinin düzgün olması oradan görünür ki, onun \dot{u}_n -ə görə törəməsinin əks işarəsi

$$F_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})^2 \quad (5.12.4)$$

n - atomuna təsir edən (5.11.3) qüvvəni verir.

Qeyd edək ki, potensial enerjini $F_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n} = -\beta(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1})^2$ kimi də yazmaq olar, çünki bu halda da (5.12.4) alınır. $u_n(t)$ yerdəyişmələri periodik funksiya olduğuna görə onları harmonikalarına ayırmaq olar. Onda real yerdəyişmə üçün yaza bilərik:

$$u_n = \sum_q [A_q e^{i(qn - \omega_q t)} + A_q^* e^{i(qn - \omega_q t)}] = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_q \{a_q e^{iqn} + a_q^* e^{-iqn}\} \quad (5.12.5)$$

Burada

$$a_q = \sqrt{G} A_q e^{-i\omega_q t} \quad (5.12.6)$$

işarə edilmişdir.

$\dot{a}_q = -i\omega_q a_q$ və $\dot{a}_q^* = i\omega_q a_q^*$ olduğunu nəzərə alaraq (5.12.5)-i (5.12.2)-də yerinə yazsaq, kinetik enerjinin ifadəsi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\begin{aligned} K &= \frac{M}{2} \sum_{n=1}^G \dot{u}_n \dot{u}_n = \frac{M}{2} \sum_{n=1}^G \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_q \{\dot{a}_q e^{iqn} + \dot{a}_q^* e^{-iqn}\} \times \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_q \{\dot{a}_q e^{iqn} + \dot{a}_q^* e^{-iqn}\} = \\ &= -\frac{M}{2G} \sum_{q'} \sum_{n=1}^G \omega_{q'} \omega_q \times \{a_q a_{q'} e^{i(q+q')n} - a_q a_q^* e^{i(q-q')n} - a_q^* a_q e^{-i(q-q')n} + a_q^* a_q^* e^{-i(q+q')n}\} \end{aligned} \quad (5.12.7)$$

Burdan görünür ki, K -nı tapmaq üçün $L = \sum_{n=1}^G e^{iqn}$ tipli cəmi hesablamaq lazımdır. Dalğa ədədinin (5.11.18) qiymətlərini $q = \frac{2\pi}{\alpha G} g$, $g = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm G/2$ yada salsaq:

$$\sum_{n=1}^G e^{iqn} = \sum_{n=1}^G e^{i \frac{2\pi}{G} g n} = \sum_{n=1}^G l^n, \quad (5.12.8)$$

harada ki,

$$l = e^{i \frac{2\pi}{G} g} \quad (5.12.9)$$

Burada iki hala baxaq:

1) $q \neq 0$, yəni $g \neq 0$. Bu halda $l \neq 1$ - dir və

$$L = \sum_{n=1}^G l^n = l + l^2 + \dots + l^G = \frac{l(1-l^G)}{1-l} = 0,$$

Çünkü $l^0 = e^{i2\pi} = 1$. Yeni:

$$L(q \neq 0) = \sum_{n=1}^G e^{iqn} = 0, \quad q \neq 0 \text{ olduqda} \quad (5.12.10)$$

2) $q = 0$, yeni bütün $g = 0$. Bu halda (5.12.9)-dan $l = 1$ və:

$$L = \sum_{n=1}^G l^n = \sum_{n=1}^G 1 = G \text{ əgər } q = 0. \quad (5.12.11)$$

Beləliklə:

$$\sum_{n=1}^G e^{iqn} = \begin{cases} 0, & \text{əgər } q \neq 0 \\ G, & \text{əgər } q = 0. \end{cases} \quad (5.12.12)$$

Eynilə:

$$\sum_{n=1}^G e^{i(q \pm q')n} = \begin{cases} 0, & \text{əgər } q \pm q' \neq 0 \\ G, & \text{əgər } q \pm q' = 0 \end{cases} \quad (5.12.12a)$$

yaza bilərik.

Bu cəmləmə qaydasını (5.12.7) ifadəsinə tətbiq etsək və $\omega_q = \omega_{-q}$ olduğunu nəzərə alsaq, kinetik enerji üçün:

$$K = \frac{M}{2} \sum_q \omega_q^2 (2a_q a_q^* - a_q a_{-q} - a_q^* a_{-q}^*) \quad (5.12.13)$$

alırıq.

İndi də potensial enerjinin şəklini dəyişdirək. (5.12.3) və (5.12.5) – dən

$$U = \frac{\beta}{2} \sum_{n=1}^G (u_n - u_{n-1})(u_n - u_{n-1}) = \frac{\beta}{2G} \sum_{q, q'} \sum_{n=1}^G [a_q e^{iqn} + a_q^* e^{-iqn} - a_q e^{-iqn} e^{iqn} - a_q^* e^{iqn} e^{-iqn}] \times \\ \times [a_{q'} e^{iq'n} + a_{q'}^* e^{-iq'n} - a_{q'} e^{-iq'n} e^{iq'n} - a_{q'}^* e^{iq'n} e^{-iq'n}] \quad (5.12.4)$$

alınır. Buradakı mötərizələri vurduqdan sonra (5.12.12a)-nın köməyi ilə n və q' -ə görə cəmləməni aparsaq və $e^{iqn} + e^{-iqn} = 2 \cos aq$; $1 - \cos aq = 2 \sin^2 aq/2$ və (5.11.9)-dan $\sin^2 aq/2 = M\omega_q^2/4\beta$ olduğunu nəzərə alsaq, potensial enerji üçün:

$$U = \frac{M}{2} \sum_q \omega_q^2 (2a_q a_q^* + a_q a_{-q} + a_q^* a_{-q}^*) \quad (5.12.15)$$

alırıq. K və U -nun (5.12.13) və (5.12.15) ifadələrini toplasaq rəqs edən birölçülü qəfəsin tam enerjisi aşağıdakı kimi ifadə olunur

$$E = K + U = 2M \sum_q \omega_q^2 a_q a_q^* \quad (5.12.16)$$

Göründüyü kimi, tam enerji a_q koordinatları vasitəsilə çox sadə şəkildə ifadə edilir. a_q koordinatları **normal koordinatlar** adlanır. Lakin kompleks koordinatlardan real X_q və P_q normal koordinatlarına keçmək daha uyğundur. Real koordinatlar:

$$X_q = a_q + a_q^* = 2 \operatorname{Re}(a_q) \\ P_q = M\dot{X}_q = \frac{M\omega_q}{i} (a_q - a_q^*) = \frac{M\omega_q}{i} 2 \operatorname{Im}(a_q) \quad (5.12.17)$$

şəklində seçilə bilər. Onda:

$$a_q = \frac{1}{2} \left(X_q + i \frac{P_q}{M\omega_q} \right), \quad (5.12.18)$$

$$a_q^* = \frac{1}{2} \left(X_q - i \frac{P_q}{M\omega_q} \right)$$

olar.

Burada cəm işarəsi altında olan mötərizə tezliyi ω_q olan harmonik ossilyatorun enerjisidir. X_q və P_q normal koordinatlar, bunlarla ifadə olunan harmonik rəqslər isə **normal rəqslər – modlar** adlanır.

Birölçülü qəfəsin dalğa ədədi (5.11.18) G sayda qiymət aldığından, (5.12.19) ifadəsinə qəfəsdə mümkün olan tezliklərin sayı qədər ossilyatorun enerjisi daxildir.

Beləliklə, birölçülü qəfəsin Hamilton funksiyasını X_q və P_q normal koordinatları ilə ifadə etməklə aşağıdakı çox mühüm nəticəyə gəlirik:

Rəqsi hərəkətdə olan birölçülü sadə qəfəsin tam enerjisi qəfəsdə mümkün olan G sayda tezliklərin sayı qədər harmonik ossilyatorların enerjilərinin cəminə bərabərdir.

Ossilyatorun hər biri ω_q tezliklərindən biri ilə rəqs edir və bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə olmurlar.

Tam enerjinin (5.12.19) ifadəsini üçölçülü qəfəs halı üçün də ümumiləşdirmək olar. Bu halda $\omega_j(q)$ tezliklərinin sayı $3sN$ -ə bərabərdir (bax şəkil 5.17).

Üçölçülü qəfəslər üçün tam enerji:

$$E = \sum_q \sum_{j=1}^{3s} \left\{ \frac{1}{2M} P_j^2(\vec{q}) + \frac{M}{2} \omega_j^2(\vec{q}) Q_j^2(\vec{q}) \right\} = \mathcal{H}(Q, R) \quad (5.12.20)$$

Burada $Q_j(\vec{q})$ və $P_j(\vec{q})$ - üçölçülü qəfəsin normal koordinatları, $\mathcal{H}(Q, R)$ isə Hamilton funksiyasıdır. Sadəlik üçün özəkdə olan atomların kütləsi $M_1 = M_2 = \dots = M_s = M$ qəbul edilmişdir.

Enerjinin (5.12.20) ifadəsindən görünür ki, üçölçülü qəfəsin tam enerjisi $3sN$ sayda harmonik ossilyatorların enerjiləri cəminə bərabərdir. Bu nəticə kristallik bərk cisimlərin istilik xassələrinin nəzəriyyəsinə qurmaq üçün çox vacibdir.

§5.13. Qəfəsin rəqslərinin kvantlanması. Fonon qazı

Kvant mexanikasında olan uyğunluq prinsipinə görə sistemin Hamilton funksiyasını bilsək, onun Hamilton operatorunu tapa bilərik. Bunun üçün Hamilton funksiyasında impulsu məlum qaydada uyğun

operatorla əvəz etmək lazımdır. Kristal qəfəs üçün Hamilton funksiyasında

$$P_i(\vec{q}) = \frac{\hbar}{i} \cdot \frac{\partial}{\partial Q_i(\vec{q})} \quad (5.13.1)$$

əvəzləməsini etsək, qəfəsin Hamilton operatorunu

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\vec{q}} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2(\vec{q})} + \frac{M}{2} \omega_j^2(\vec{q}) Q_j^2(\vec{q}) \right\} \quad (5.13.2)$$

Alarıq, (5.13.2)-ni

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\vec{q}} \hat{\mathcal{H}}_{\vec{q}} \quad (5.13.3)$$

şəklində yazaq, harada ki,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\vec{q}} = -\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2(\vec{q})} + \frac{M}{2} \omega_j^2(\vec{q}) Q_j^2(\vec{q}) \quad (5.13.4)$$

(\vec{q}, j) tipli harmonik ossilyatorun Hamilton operatorudur.

Kristal qəfəs üçün Şredinger tənliyini yazaq:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi. \quad (5.13.5)$$

Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}}$ harmonik ossilyatorların Hamilton operatorlarının cəminə (5.13.3) bərabər olduğuna görə (5.13.5) tənliyinin məxsusi funksiyaları

$$\psi = \prod_{\vec{q}, j} \psi_{N_{\vec{q}, j}}(Q) \quad (5.13.6)$$

və məxsusi qiymətləri

$$E = \sum_{\vec{q}, j} \varepsilon_{N_{\vec{q}, j}} \quad (5.13.7)$$

kimi yazıla bilər.

$$\hat{\mathcal{H}}_{\vec{q}} \psi_{N_{\vec{q}, j}}(Q) = \varepsilon_{N_{\vec{q}, j}} \psi_{N_{\vec{q}, j}}(Q) \quad (5.13.8)$$

(\vec{q}, j) tipli ossilyator üçün Şredinger tənliyinin həllidir, burada $\hat{\mathcal{H}}_{\vec{q}, j}$ (5.13.4) ilə verilir.

(5.13.8) tənliyinin həlli məlumdur: məxsusi funksiya

$$\psi_N(Q) = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^N N!}} e^{-Q^2/2\hbar} H_N \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} Q \right) \quad (5.13.9)$$

harmonik ossilyatorun dalğa funksiyası, H_N - Ermit polinomudur; məxsusi qiymət

$$\varepsilon_{N_{\vec{q}, j}} = \left(N_{\vec{q}, j} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_j(\vec{q}). \quad (5.13.10)$$

Burada $N_{\vec{q}, j} = 0, 1, 2, \dots$ ossilyator kvant ədədidir.

Beləliklə, (5.13.7) və (5.13.10)-dan rəqs edən kristal qəfəsin tam enerjisi:

$$E = \sum_{\vec{q}} \left(N_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_j(\vec{q}) \quad (5.13.11)$$

və ya:

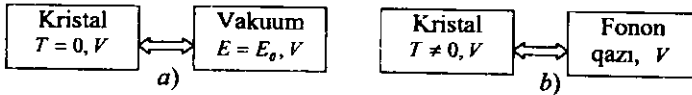
$$E = E_0 + \sum_{\vec{q}, j} N_{\vec{q}, j} \hbar \omega_j(\vec{q}). \quad (5.13.12)$$

Burada $E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}, j} \hbar \omega_j(\vec{q})$ -sıfırıncı rəqslərin enerjisidir.

İndi enerjinin (5.13.12) ifadəsini analiz edək. Əgər bütün ossilyatorlar əsas haldadırlarsa, yeni istənilən (\vec{q}, j) üçün $N_{\vec{q}, j} = 0$ -dirsə, onda

$$E = E_0 \quad (5.13.13)$$

olur. Bu qəfəsin əsas halıdır və bu o zaman mümkün olar ki, temperatur sıfır olsun ($T=0$). Kristalın bu halına eyni həcmdə içi boş bir qab (vakuum) qarşı qoyaq (şəkil 5.18.1).



Şəkil 5.18. Kristal qəfəsin əsas (a) və həyacanlanmış (b) halları

Temperatur sıfırdan fərqli olanda, ossilyatorların bəzisi həyacanlanmış hala keçir, yəni $N_{\vec{q}, j} = 1$ olur. Bu zaman kristalın enerjisi $\hbar \omega_j(\vec{q})$ qədər artır. Hər dəfə ossilyatorlar yeni həyacanlanmış hala keçdikdə kristalın enerjisi $\hbar \omega_j(\vec{q})$ -lərin misilləri qədər artır. Enerjinin $\hbar \omega_j(\vec{q})$ qədər artmasını kristala qarşı qoyulmuş qabda enerjisi $\varepsilon_j(\vec{q}) = \hbar \omega_j(\vec{q})$ və impulsu $\vec{p} = \hbar \vec{q}$ olan bir kvazizərrəciyin yaranması kimi təsəvvür etmək olar. Həmin kvazizərrəcik fonon adlanır:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_j(\vec{q}) &= \hbar \omega_j(\vec{q}) \\ \vec{p} &= \hbar \vec{q} \end{aligned} \right\} \text{fonon.} \quad (5.13.14)$$

Fononların real zərrəciklər deyil, kvazizərrəciklər adlanmasına səbəb odur ki, onların impulsları, (5.11.62)-dən görüldüyü kimi, birqiymətli olmayıb ixtiyari tərs qəfəs vektoru \vec{b}_s dəqiqliyi ilə təyin olunur: impulsun $\vec{p} = \hbar \vec{q}$ və $\vec{p} = \hbar(\vec{q} + \vec{b}_s)$ qiymətlərinə eyni enerjili $\hbar \omega_j(\vec{q}) = \hbar \omega_j(\vec{q} + \vec{b}_s)$ fonon uyğun gəlir. Fononlar yalnız kristal daxilində mümkündürlər, yeni kristaldan xaricdə fonon ola bilməz. Bütün bunları ümumiləşdirərək belə qənaətə gəlirik ki, fononlar kristal qəfəsində yayılan istilik dalğalarının enerji kvantıdır.

Kristal qəfəsində mümkün olan və şəkil 5.16-da sxematik göstərilən tezlik spektrini yaradan hər bir tezliyə bir tip fonon uyğundur. Fononun tipi (\vec{q}, j) ilə, yeni dalğa vektorunun qiyməti və rəqsin budağının nömrəsi

ilə təyin olunur. Deməli, N sayda özəkden ibarət olan və hər özəkdə s sayda atom olan qəfəsdə cəmi $3sN$ fonon mümkündür. Tezlik spektrinə (şəkil 5.16) uyğun olaraq akustik və optik fononlar vardır.

Kristalın temperaturu dəyişdikcə ona qarşı qoyulmuş qabda fonon qazının yaranma dinamikasını bu cür təsvir etmək olar: kristalın $T=0$ halında enerjisi $E = E_0$ -dır və ona qarşı qoyulan qab boşdur (vakuum). $T \neq 0$ olduqda əvvəlcə kiçik enerjili fononlar yaranır. Bu tezlik spektrin (şəkil 5.16) aşağı hissəsinə uyğundur. Deməli, əvvəlcə akustik fononlar yaranır. Temperatur yüksəldikcə yeni-yeni fonon tipləri yaranır, eyni zamanda əvvəlcədən yaranmış fononların sayı artır. Akustik fononlardan sonra optik tipli fononlar yaranır və temperaturun kifayət qədər yüksək qiymətlərində bütün $3sN$ tip fononların hamısı oynamış olur. Bundan sonra temperaturun artması artıq yeni tip fonon yaratmır, yalnız fononların sayını artırır.

Klassik dildə, fononların tipi qəfəsdə yayılan rəqslərin tezliyinə, onların sayı isə bu rəqslərin intensivliyinə (amplitudun kvadratına mütənasib) uyğundur.

Kristalın tam enerjisi (5.13.12)-dən

$$E = E_0 + E_f \quad (5.13.15)$$

şəkilde yazıla bilər, burada

$$E_f = \sum_{\vec{q}} N_{\vec{q}} \hbar \omega(\vec{q}) \quad (5.13.16)$$

fonon qazının enerjisidir. Bu ifadədən görünür ki, ossilyator kvant ədədinin aydın fiziki mənası vardır: $N_{\vec{q}}$ - tezliyi $\omega_j(\vec{q})$ olan, yəni (\vec{q}, j) tipli fononların sayıdır.

İndi V həcmi tutan fonon qazının T temperaturunda tam enerjisi və (\vec{q}, j) tipli fononların orta sayını tapaq. Bunun üçün statistik fizikada orta qiymətləri hesablamaq metodunu ideal fonon qazına tətbiq edək.

Fonon qazının enerjisinin \bar{E}_f orta qiymətini tapmaq üçün, (5.13.16)-dan görüldüyü kimi $\overline{N_{\vec{q}} \hbar \omega(\vec{q})}$ orta qiyməti hesablamaq lazımdır.

$$\overline{N_{\vec{q}} \hbar \omega(\vec{q})} = \sum_{N_{\vec{q}}} N_{\vec{q}} \hbar \omega_j(\vec{q}) W_{N_{\vec{q}}} \quad (5.13.17)$$

Burada

$$W_{N_{\vec{q}}} = A e^{-\beta N_{\vec{q}} \hbar \omega_j(\vec{q})} \quad (5.13.18)$$

Bolsman paylanması, $\beta = \frac{1}{k_0 T}$. A - normallaşma şərtindən tapılan sabitdir:

$$\sum_{N_{\vec{q}}} W_{N_{\vec{q}}} = A \sum_{N_{\vec{q}}} e^{-\beta N_{\vec{q}} \hbar \omega_j(\vec{q})} = 1.$$

Buradan A -ni tapıb (5.13.18) -də yerinə yazsaq, Bolsman paylanması üçün

$$W_{N_{q,j}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta N_{q,j} \hbar \omega_j(\vec{q})} \quad (5.13.19)$$

alırıq, burada

$$\sum_{N_{q,j}} W_{N_{q,j}} = Z = \sum_{N_{q,j}=0}^{\infty} e^{-\beta N_{q,j} \hbar \omega_j(\vec{q})} \quad (5.13.20)$$

statistik cəmdir. (5.13.17) və (5.13.19)-dən (\vec{q}, j) tipli fononların orta enerjisi üçün alırıq:

$$\overline{N_{q,j} \hbar \omega_j(\vec{q})} = -\frac{d \ln Z}{d\beta}. \quad (5.13.21)$$

Demək (5.13.20)-də olan statistik cəmi - Z -i hesablamaq lazımdır. Göründüyü kimi:

$$Z = 1 + e^{-\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} + e^{-2\beta \hbar \omega_j(\vec{q})} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_j(\vec{q})}}. \quad (5.13.22)$$

Beləliklə,

$$\overline{N_{q,j} \hbar \omega_j(\vec{q})} = \frac{\hbar \omega_j(\vec{q})}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q}) / k_B T} - 1} \quad (5.13.23)$$

alırıq. Buradan (q, j) tipli fononların T temperaturundakı orta sayı üçün

$$\overline{N_{q,j}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q}) / k_B T} - 1} \quad (5.13.24)$$

alırıq. Bu funksiya **Plank funksiyası** adlanır. Plank funksiyası (5.13.24) **Boze** paylanma funksiyasının xüsusi halıdır. Boze paylanma funksiyasında kimyəvi potensialı $\xi = 0$ qəbul etsək, Boze funksiyası Plank funksiyası ilə (5.13.24) üst-üstə düşər. Deməli, **fonon qazı kimyəvi potensialı sıfır olan Boze qazıdır**.

Nəticədə fonon qazının orta enerjisi üçün (5.13.16) və (5.13.23)-dən

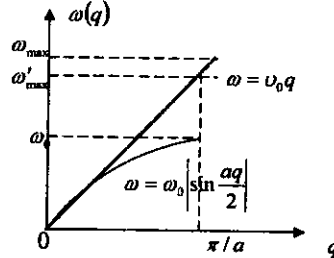
$$\overline{E_j} = \sum_{\vec{q}} \frac{\hbar \omega_j(\vec{q})}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q}) / k_B T} - 1} \quad (5.13.25)$$

alırıq.

Qazda olan fononların T temperaturundakı tam sayını

$$N(T) = \sum_{\vec{q}} \overline{N_{q,j}} = \sum_{\vec{q}} \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_j(\vec{q}) / k_B T} - 1} \quad (5.13.26)$$

hesablamaq üçün tezliyin dispersiyasını yeni, $\omega_j(\vec{q})$ funksiyasının açıq şəklini bilməyimiz lazımdır. Ümumi halda $\omega_j(\vec{q})$ funksiyasının analitik şəkli məlum olmadığından xüsusi bir hala baxaq. Akustik fononların tam sayının temperaturdan asılılığını tapaq. Bunun üçün çox sadə bir model seçək (şəkil 5.19).



Şəkil 5.19. Debay modeli

Yəni kontinum yaxınlaşmasında tezliyi

$$\omega_j(\vec{q}) = v_0 \vec{q} \quad (5.13.27)$$

şəklində seçək və fərz edək ki, səsin sürəti v_0 bütün budaqlar üçün eynidir (üç qat cırlaşmış akustik budaq). Bu model **Debay modeli** adlanır (bax §8, şəkil 8.4).

Kvazidiskret vektoru \vec{q} üzrə cəmləmədən məlum

$$\sum_{\vec{q}} (\dots) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int (\dots) d\vec{q} \quad (5.13.28)$$

qayda ilə inteqrala keçsək, (5.13.26)

$$N_{ak}(T) = \frac{3V}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}}{e^{h\omega(\vec{q})/k_B T} - 1} \quad (5.13.29)$$

şəklinə düşər. Burada V -fonon qazı olan qabın, yəni kristalın həcmi, $d\vec{q} = dq_x dq_y dq_z$, \vec{q} -fəzasında həcm elementidir, 3 rəqəmi – akustik budaqların sayıdır.

Tezlik $\omega(\vec{q})$ yalnız dalğa vektorunun qiymətindən (dalğa ədədindən) (5.13.27) asılı olduğuna görə (5.13.29) inteqralında sferik koordinatlara keçə bilərik $d\vec{q} = q^2 dk \sin \theta d\theta d\varphi$.

Bucaqlara görə inteqral 4π verdiyindən (5.13.29)

$$N_{ak}(T) = \frac{3V}{2\pi^2} \int \frac{q^2 dq}{e^{h\omega(\vec{q})/k_B T} - 1} \quad (5.13.30)$$

şəklinə düşər. Burada dalğa ədədinə görə inteqraldan tezliyə görə inteqrala keçmək münasibdir. Bunun üçün (5.13.27)-dən istifadə etsək,

$$N_{ak}(T) = \frac{3V}{2\pi^2 v_0^3} \int_0^{\omega_{max}} \frac{\omega^2 d\omega}{e^{h\omega/k_B T} - 1} \quad (5.13.31)$$

alarlıq. Burada kristal kontinumdan ayıran fərq ondadır ki, ξ -yə görə inteqral $(0, \infty)$ intervalında deyil, $(0, \omega_{max})$ intervalında aparılır. İnteqralın üst sərhəddi ω_{max} aşağıdakı şərtdən tapılır: akustik fononların tam sayı $3N$ -ə bərabərdir, yəni:

$$\sum_{\vec{q}} \sum_{j=1}^3 1 = 3N \quad (5.13.32)$$

Buradan N - qəfəsdə olan elementlər özəklərin sayıdır. Bu şərt (5.13.28)-in köməyi ilə

$$\frac{3V}{(2\pi)^3} \int dq = 3N \quad (5.13.33)$$

və ya (5.13.27)-dən istifadə etsək,

$$\frac{3V}{2\pi^2 v_0^3} \int_0^{\omega_{max}} \omega^2 d\omega = 3N \quad (5.13.34)$$

şəklinə düşür. Nəticədə ω_{max} üçün:

$$\omega_{\max} = \nu_0 \left(\frac{6\pi^2}{\Omega_0} \right)^{1/3} = \nu_0 \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{a} \quad (5.13.35)$$

alırıq. $\Omega_0 = \frac{V}{N}$ - elementar özəyin həcmidir. Kubik kristallar üçün $\Omega_0 = a^3$. Qeyd edək ki, (5.13.35) kimi tapılan ω_{\max} həm (5.11.10) dispersiya münasibətinə daxil olan $\omega_{\max} = \omega_0 = \frac{2\nu_0}{a}$, həm də $\omega'_{\max} = \nu_0 q_{\max} = \frac{\pi}{a} \nu_0$ qiymətlərindən fərqlidir. (5.13.35)-dən hesablanan ω_{\max} hər iki haldakı tezlikdən (ω_0 və ω'_{\max}) böyükdür (şəkil 7.2). Akustik fononların sayı üçün (5.13.34) tənliyini:

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N \quad (5.13.36)$$

şəklində yazsaq, burada:

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 \nu_0^3} \omega^2 \sim \omega^2 \quad (5.13.37)$$

funksiyasının vahid tezlik intervalına düşən akustik fononların sayı kimi fiziki mənaya malik olduğu aydındır. Göründüyü kimi bu funksiya kontinium yaxınlaşmasında tezliyin kvadratına mütənasibdir $g(\omega) \sim \omega^2$ (şəkil 5.20):

Fononların ümumi sayı üçün olan (5.13.31) düsturunda $x = \frac{\hbar\omega}{k_0 T}$ dəyişəni qəbul etsək,

$$N_{ak}(T) = \frac{3V}{2\pi^2 \nu_0^3} \left(\frac{k_0 T}{\hbar} \right)^{3/2} \int_0^{\theta} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} \quad (5.13.38)$$

olar. Burada

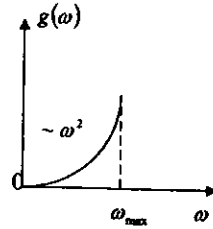
$$\theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_0} = \frac{\hbar\nu_0}{k_0} \left(\frac{6\pi^2}{V/N} \right)^{1/3} \quad (5.13.39)$$

Debay temperaturu adlanır. Göründüyü kimi, θ elə bir xarakteristik temperaturdur ki, bu temperaturda mümkün olan bütün akustik tezlikli rəqslər ($k_0\theta = \hbar\omega_{\max}$) oyanmışdır, yəni fonon qazında ən böyük $\hbar\omega_{\max}$ enerjili akustik fonon belə yaranmış olur.

(5.13.39) nəzərə alınsa akustik fononların (5.13.38) sayı

$$N_{ak}(T) = \frac{9}{2} N \left(\frac{T}{\theta} \right) D_2 \left(\frac{\theta}{T} \right) \quad (5.13.38a)$$

şəklinə düşər. Burada



Şəkil 5.20. Kristal qəfəsdə akustik fononlar spektri

$$D_n\left(\frac{\theta}{T}\right) = n \left(\frac{T}{\theta}\right)^n \int_0^{\frac{\theta}{T}} \frac{x^n dx}{e^x - 1} \quad (5.13.40)$$

Debay funksiyasıdır. Temperatur ($0 \rightarrow \infty$) intervalında dəyişdikdə bu funksiya ($0 \rightarrow 1$) arasında qiymət alır.

Temperaturun iki limit halına baxaq.

Yüksək temperaturlar $T \gg \theta$. Bu halda $e^x = 1 + x + \dots$ kimi yazsaq. $D_2 = 1$ olar və fonoların sayı üçün

$$N_{ak}(T) = \frac{9}{2} N \frac{T}{\theta} \sim T; \quad T \gg \theta \quad (5.13.38 b)$$

alırıq, yeni fononların sayı yüksək temperaturlarda T ilə düz mütənasibdir (şəkil 5.21).

Aşağı temperaturlar $T \ll \theta$. Bu halda (5.13.40) integralının üst sərhədini $\theta/T \rightarrow \infty$ -la əvəz etmək olar. Bu zaman alınan integral

$$\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = \Gamma(3)\zeta(3) = 2 \cdot 1,2 = 2,4 \quad (5.13.41)$$

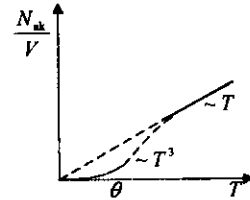
olar. Burada $\Gamma(n)$ -Qamma, $\zeta(n)$ isə Zeta funksiyalarıdır.

Beləliklə, aşağı temperaturlarda ($T \ll \theta$) akustik fononların sayı:

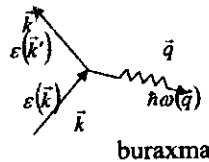
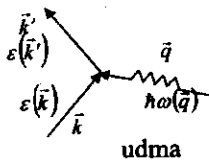
$$N_{ak}(T) = 21,6N \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \sim T^3 \quad T \ll \theta. \quad (5.13.42)$$

Yəni N_{ak} temperaturun kubu ilə mütənasibdir (şəkil 5.21).

Qeyd edək ki, fononlarla yığılma kristal qəfəsin istilik tutumunun, istilikkeçirmənin nəzəriyyəsinə qurmaqda və metallarda keçirici elektronların kristal qəfəsi ilə qarşılıqlı təsirini araşdırmaqda çox əlverişlidir. Bu hallarda rəqs edən kristal əvəzinə, ideal fonon qazına baxmaq, yeni elektron qazının fonon qazı ilə qarşılıqlı təsirini araşdırmaq kifayətdir.



Şəkil 5.21. Kristalda akustik fononların sayının temperatur asılılığını



Şəkil 5.22. Neytronun kristal qəfəsdən səpilməsi zamanı fononun udulması (a) və buraxılması (b)

Fonon qazının əsasını kristal qəfəsin rəqs tezliklərinin dalğa vektorundan asılılığı, yəni $\omega,(\vec{q})$ dispersiya münasibəti təşkil edir. Bu asılılıq sxematik olaraq ümumi şəkildə şəkil 5.17-də göstərilmişdir. Lakin real kristallar üçün $\omega,(\vec{q})$ dispersiya münasibətini tapmaqdan ötrü konkret kristalın simmetriyasını, onun kimyəvi rabitələrin təbiətini nəzərə almaq, qrup nəzəriyyəsini tətbiq etmək lazımdır.

Eksperimental üsulla $\omega,(\vec{q})$ funksiyasını tapmaq üçün neytral zərəciklərin kristal qəfəsdən səpilməsindən istifadə edilir. Belə zərəciklər fotonlar və neytronlar ola bilər. Fonon spektrini, yəni $\omega,(\vec{q})$ funksiyasını tapmaq üçün ən yaxşı metod neytronların qəfəsdən səpilməsinə əsaslanır. Neytronun qəfəs ilə qarşılıqlı təsirini onun fonon udması və ya buraxması kimi təsəvvür etmək olar (şəkil 5.22).

Tutaq ki, dalğa vektoru \vec{k} olan neytron qəfəs üzərinə düşür və səpilərək \vec{k}' vektoru ilə kristalı tərk edir. Bu zaman neytron dalğa vektoru \vec{q} olan fonon uda və ya buraxa bilər (şəkil 5.22).

Bu proseslər üçün impulsun və enerjinin saxlanması qanunları

$$\vec{k} = \vec{k}' \pm \vec{q} \quad \varepsilon(\vec{k}') = \varepsilon(\vec{k}) \pm \hbar\omega(\vec{q}) \quad (5.13.43)$$

kimidir.

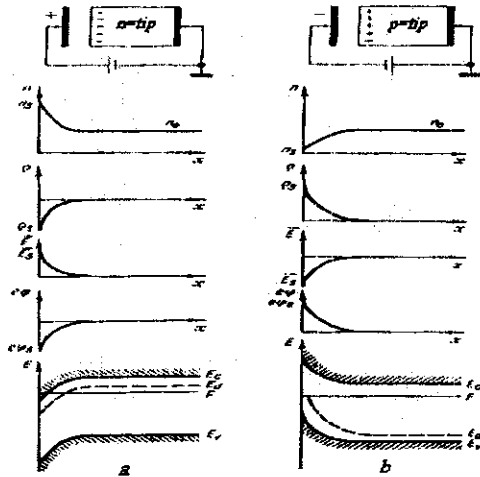
Təcrübədə neytronun səpilmə zamanı itirdiyi və ya qazandığı $\Delta\varepsilon = \pm[\varepsilon(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k})]$ enerjinin $(\vec{k}' - \vec{k}) = \pm\vec{q}$ dalğa vektorları fərqiindən asılılığını tapsaq, $\hbar\omega(\vec{q})$ kəmiyyətini, uyğun olaraq $\omega(\vec{q})$ dispersiya münasibətini təyin edə bilərik.

VI FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ KONTAKT HADİSƏLƏRİ

§6.1. Xarici elektrik sahəsində enerji zonalarının əyilməsi

Əksər yarımkeçirici cihazların işi metal-yarımkeçirici və yaxud yarımkeçirici-yarımkeçirici kontaktında baş verən hadisələrə əsaslanır.

Kontaktıyanı oblastlarda baş verən proseslər eyni olduğundan həm metal-yarımkeçirici kontaktı, həm də yarımkeçirici-yarımkeçirici kontaktı üçün kontakt hadisələrinin baş vermə mexanizmləri eynidir. Kontaktıyanı oblastda yükdaşıyıcıların yenidən paylanması və bunun nəticəsində kontakt oblastında yarımkeçiricinin enerji zonalarının əyilməsi bu proseslərin xarakterik cəhətlərindəndir. Kontakt hadisələri iki cismin kontaktında kontakt sahəsinin yaranması ilə izah oluna bilər. Lakin bu kontakt sahəsinin kontaktıyanı oblastdakı yükdaşıyıcılara təsiri hər hansı xarici elektrik sahəsinin kristalın səthıyanı oblastına təsirindən prinsipcə fərqlənmiş. Ona görə də kontakt hadisələrini başa düşmək üçün əvvəlcə xarici elektrik sahəsində yerləşdirilmiş yarımkeçiricinin xassələrinin dəyişməsinə baxmaq məqsədəuyğundur.



Şəkil 6.1

Xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə n -tip (a) və p -tip (b) yarımkeçiricidə zonaların əyilməsi, həcmi yüklərin və elektrik sahəsinin əmələ gəlməsi

Xarici elektrik sahəsində yerləşdirilmiş n -tip yarımkəçiriciyə baxaq (şəkil 61). Bu halda yarımkəçiricidə yükdaşıyıcıların paylanması dəyişir, onda mənfi həcmi yüklər $\rho(\vec{r})$ və yarımkəçiricinin dərinliyinə getdikcə azalan $\vec{E}(\vec{r})$ elektrik sahəsi yaranır:

$$\text{div}\vec{E}(\vec{r}) = \rho(\vec{r})/\epsilon\epsilon_0 \quad (6.1.1)$$

Bu $\vec{E}(\vec{r})$ daxili elektrik sahəsinin dəyişməsi elektronun $U(\vec{r})$ potensial enerjisinin dəyişməsinə səbəb olur. Bu halda potensial enerji $U(\vec{r}) = U_0(\vec{r}) + U_1(\vec{r})$ kimi təyin olunur. Burada $U_0(\vec{r})$ -elektronun xarici elektrik sahəsində potensial enerjisi, $U_1(\vec{r})$ - sahə təsiri nəticəsində potensial enerjisidir.

$$U_1(\vec{r}) = -e\varphi(\vec{r}), \quad (6.1.2)$$

burada $\varphi(\vec{r})$ -elektrostatik potensialdır. $\varphi(\vec{r})$ -in sahə ilə əlaqəsi aşağıdakı kimidir.

$$\vec{E} = -\frac{d\varphi(\vec{r})}{dr} \quad (6.1.3)$$

(6.1.1) tənliyindən görünür ki, yükdaşıyıcıların yenidən paylanması potensial enerjinin dəyişməsinə və bunun nəticəsində işə enerji zonalarında səviyyələrin sürüşməsinə səbəb olur. $E(\vec{r})$ sahəsi praktiki olaraq tamamilə yarımkəçiricinin kontaktyanı oblastında cəmləşmişdir və onun qiyməti $10^6 \frac{V}{sm}$ -dən böyük deyildir. Bu sahə atom sahələrinin intensivliyindən $\left(-10^8 \frac{V}{sm}\right)$ çox zəif olduğundan enerji zonalarının quruluşunu dəyişdirə bilmir, o, yalnız səthə yaxın təbəqədə enerji zonalarının əyilməsinə səbəb olur. Bütün enerji səviyyələri yerini dəyişdiyindən $F_c - F$ və $F - F_c$ enerji intervalları

$$E_c + U_1(\vec{r}) - F; \quad F - [E_c + U_1(\vec{r})] \quad (6.1.4)$$

ifadələrinə çevrilirlər.

Lakin Fermi səviyyəsi termodinamik tarazlıq halında sabitdir, ona görə də bu səviyyə ilə zonalar arasındakı sərhəd dəyişə bilər.

Fermi səviyyəsinin qadağan olunmuş zonanın sərhədlərinə nisbətən vəziyyəti dəyişdikdə elektronların səviyyələrə görə paylanması dəyişir, bu işə yarımkəçiricinin xassələrinin dəyişməsinə səbəb olur. Şəkil 6.1,a-dan görüldüyü kimi, Fermi səviyyəsi keçirici zonada yerləşdiyindən n tip yarımkəçiricinin səth təbəqəsi cırılmamış haldan cırılmış hala keçir. Zonanın əyilmə istiqaməti $U_1(\vec{r})$ -in işarəsindən asılıdır. Baxdığımız halda zonalar aşağıya tərəf əyilir.

Əgər yarımkəçiriciyə tətbiq olunan gərginliyin istiqamətini dəyişsək, səth təbəqəsində yükdaşıyıcıların paylanma xarakteri də

dəyişər. Səth təbəqəsində əlavə müsbət $\rho(\bar{r})$ yüklərinin əmələ gəlməsi nəticəsində daxildəki sahə intensivliyinin istiqaməti və elektronların $U_1(\bar{r})$ potensial enerjisi dəyişir, bu səbəbdən zonanın əyilmə istiqaməti də dəyişir (şəkil 6.1,b). Ona görə də zonalar kifayət qədər güclü əyilərsə səth təbəqəsinin elektrik keçiriciliyinin n -tipdən p -tipə dəyişməsi baş verir, çünki bu oblastda əsas yükdaşıyıcıların tipi dəyişir. Elektrik keçiriciliyinin tipinin dəyişdiyi lay **inversiya layı** və ya **çevrilmiş lay** adlanır. Onda nümunənin dərinliyinə getdikcə elə bir lay tapmaq olar ki, orada $p \approx n = n_i$ olsun. Bu lay məxsusi keçiriciliyə malik olan laydır. Bu laya i -layı, yarımkeçiricinin elektrik keçiriciliyinin tipinin dəyişdiyi oblasta isə **fiziki $p-n$ keçid** deyilir. Göründüyü kimi bu lay xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə yaranır. Sahə olmadıqda bu lay da yox olur.

Bütün bu dəyişikliklər nümunənin səthindən çox kiçik məsafədə baş verir. Ona görə də sahənin müəyyən dərinliyə nüfuz etməsindən və yaxud əlavə həcmi yüklər oblastından danışmaq olar. Bu kəmiyyəti təyin edək. Bunun üçün sahə potensialı $\varphi(\bar{r})$ üçün (6.1.3) düsturunu nəzərə almaqla (6.1.1) Puasson tənliyindən istifadə edək. Sadəlik üçün birölçülü hala baxaq. Onda:

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon\epsilon_0} \quad (6.1.5)$$

n - tip cırlaşmamış yarımkeçirici üçün $n = N_c e^{\frac{E_c - F}{k_0 T}}$ ifadəsinə və (6.1.4) düsturuna əsasən əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsinə belə yazmaq olar:

$$n = N_c e^{\frac{E_c + U(x) - F}{k_0 T}} = N_c e^{\frac{E_c - F}{k_0 T}} e^{\frac{U(x)}{k_0 T}} = n_0 e^{\frac{U(x)}{k_0 T}} \quad (6.1.6)$$

Burada n_0 - yarımkeçiricinin həcmində yükdaşıyıcıların tarazlıq konsentrasiyasıdır.

Yarımkeçirici n -tip olduğundan səthəyən layda həcmi yük donor ionlarının müsbət yükləri $N_d^+ = p_d$ və elektronlarla $\rho = e[p_d - n(x)]$ təyin olunur.

Otaq temperaturunda aşqarların tamamilə ionlaşdığını $N_d = p_d = n_0$ nəzərə alsaq yaza bilərik:

$$\rho = e[n_0 - n(x)] \quad (6.1.7)$$

(6.1.6) tənliyini (6.1.7)-də yerinə yazsaq alarıq:

$$\rho = e \left[n_0 - n_0 e^{\frac{U}{k_0 T}} \right] = e n_0 \left(1 - e^{\frac{U}{k_0 T}} \right) \quad (6.1.8)$$

Onda (6.1.5) tənliyi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{en_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(1 - e^{-\frac{U}{k_0T}} \right) \quad (6.1.9)$$

(6.1.9) tənliyi ümumi xarakter daşıyır və $\varphi(x)$ potensialının, yükdaşıyıcıların və səth təbəqəsində əmələ gələn həm mənfi, həm də müsbət həcmi yüklərin konsentrasiyasının dəyişməsinə təsvir edir. Doğrudan da $\varphi > 0$ olduqda $\bar{E} < 0$ olur və sərbəst elektronların nümunənin dərinliyinə getməsi nəticəsində müsbət həcmi yüklər əmələ gəlir. Səthdə elektronların konsentrasiyası $n_s = 0$ olub yarımqeçiricinin dərinliyinə getdikcə n_0 tarazlıq konsentrasiyasına qədər artır. Konsentrasiyanın dəyişdiyi oblast daxilində donor ionları hesabına kompensə olunmamış müsbət yüklər yaranır və bu yüklərin paylanması (6.1.9) ifadəsi şəklində olan Puasson tənliyi ilə təsvir olunur.

Əgər (6.1.9) tənliyində $U \ll k_0T$ qəbul etsək (bu sahə təsiri ilə

zonaların azacıq əyilməsinə uyğun gəlir) və $e^{-\frac{U}{k_0T}}$ -ni sıraya ayıraraq sıranın birinci həddi ilə kifayətlənsək (6.1.2) tənliyini nəzərə almaqla aşağıdakı ifadə alınar:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{en_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[1 - e^{-\frac{e\varphi}{k_0T}} \right] = -\frac{en_0}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(1 - 1 - \frac{e\varphi}{\varepsilon\varepsilon_0 k_0T} \right) = \frac{e^2 n_0 \varphi}{\varepsilon\varepsilon_0 k_0T} \quad (6.1.10)$$

(6.1.10) tənliyinin həlli $\varphi(x)$ -in aşkar şəklini tapmağa imkan verir:

$$\varphi(x) = \varphi_1(x_0) e^{\frac{x}{\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0 k_0T / n_0 e^2}}} + \varphi_2(x_\infty) e^{-\frac{x}{\sqrt{\varepsilon\varepsilon_0 k_0T / n_0 e^2}}} \quad (6.1.11)$$

Burada $\varphi_1(x_0)$ və $\varphi_2(x_\infty)$ - $x=0$ və $x=\infty$ nöqtələrində sərhəd şərtlərindən təyin edilir; $\varphi_1(x_0) = \varphi_s$ - potensialın səthdəki qiyməti, $\varphi_2(x_\infty) = 0$ - potensialın yarımqeçiricinin daxilindəki qiymətidir. (6.1.11) tənliyinin həllində

$$\ell_D = \sqrt{\varepsilon\varepsilon_0 k_0T / (n_0 e^2)} \quad (6.1.12)$$

əvəzləməsini aparmaq əlverişlidir. ℓ_D - $\varphi(x)$ potensialının e dəfə azalmasına uyğun gələn xarakteristik uzunluqdur. Onda:

$$\varphi(x) = \varphi_s e^{-\frac{x}{\ell_D}} \quad (6.1.13)$$

(6.1.12) ifadəsi **Debayın ekranlanma məsafəsi** adlanır. ℓ_D -nin fiziki mənası ondan ibarətdir ki, o, səthdən məhz ℓ_D məsafəsi ilə xarakterizə olunan oblastda sahənin, potensialın, yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının və enerji zonalarının dəyişməsinə göstərir. Başqa sözlə xarici sahəni ekranlayan əlavə həcmi yüklərin əmələ gətirdiyi oblast Debayın ekranlanma məsafəsi ilə məhdudlaşır və ℓ_D məsafəsi verilmiş

kristalda neytrallığın bərpa olunduğu məsafəni xarakterizə edir. Yarımkəçiricilərdə və metallarda bu hadisələrə baxışda prinsiplial fərq yoxdur. Deməli metallarda da ekranlanma effekti mövcuddur. Lakin (6.1.12) ifadəsini nəzərə almaqla görmək olar ki, yükdaşıyıcılarının konsentrasiyası böyük olan metallarda - $n \approx 10^{23} \text{ sm}^{-3}$, ekranlanma məsafəsi kiçikdir - $\sim 10^{-8} \text{ sm}$ -dir, yəni bu məsafə atomlararası məsafədən kiçikdir, ona görə də əlavə həcmi yük praktiki olaraq metalın səthində toplanır. Yarımkəçiricilərdə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası isə metallara nisbətən kifayət qədər azdır və geniş intervalda dəyişə bilər. Ona görə də yarımkəçiricilərdə Debay ekranlanma məsafəsi metallardakından xeyli böyükdür. Məsələn, Silisium üçün ($\epsilon = 12$) $n_0 = 10^{14} \text{ sm}^{-3}$ olduqda sahə nümunənin daxilinə $\sim 4 \text{ mkm}$ məsafəyə nüfuz edir.

(6.1.13) ifadəsindən $U(x)$ potensial enerji və $\rho(x)$ həcmi yüklərin sıxlığı üçün ala bilərik:

$$U(x) = -e\phi(x) = U_S e^{-x/l_D}$$

$$\rho(x) = -\frac{e^2 n_0}{k_0 T} \phi(x) = -\frac{e^2 n_0}{k_0 T} \phi_S(x) e^{-x/l_D} = \rho_S e^{-x/l_D} \quad (6.1.14)$$

Burada S indeksi ϕ, U və ϕ parametrlərinin səthdəki qiymətlərinə aid olduğunu göstərir.

(6.1.6) və (6.1.14) tənliklərinə əsasən həcmi yüklərin sıxlığını və yükdaşıyıcıların səthdəki konsentrasiyasını da tapmaq olar:

$$\rho_S = \frac{e n_0}{k_0 T} U_S \quad (6.1.15)$$

$$n_S = \frac{n_0}{k_0 T} U_S \quad (6.1.16)$$

(6.1.15) düsturundan görüldüyü kimi, səthdə yaranan ρ_S yükünün işarəsi səthdə U_S potensial enerjinin işarəsindən asılıdır. Zonaların əyilmə istiqaməti U -nun işarəsi ilə təyin olunduğundan $\rho_S(x) > 0$ olduqda zonalar yuxarıya doğru, $\rho_S < 0$ olduqda isə aşağıya doğru əyilər.

(6.1.16) düsturu göstərir ki, səthdə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası həcmdəkinə nisbətən xeyli çox ola bilər, ona görə də səth təbəqəsinin elektrik keçiriciliyi də böyük olar.

§6.2. Çıxış işi. Kontakt potensiallar fərqi

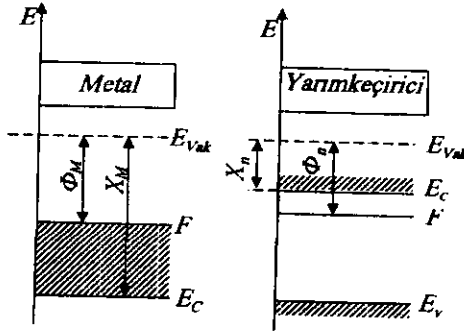
Bərk cisimlərin zona nəzəriyyəsinin güclü əlaqəli elektron yaxınlaşması modelindən alınır ki, elektronun kristal daxilində enerjisi mənfi kəmiyyətdir. Fiziki olaraq bu o deməkdir ki, elektronlara əlavə enerji verildikdə onlar kristalı tərk edə bilərlər. Başqa sözlə bərk cisimlə

vakuumin sərhəddində elektronun kristalı özbaşına tərək etməsinə mane olan hər hansı enerjiyə çəpər mövcuddur (şəkil 6.2).

Bu çəpəri aşmaq üçün müəyyən enerji sərf etmək lazımdır ki, buna da *çixış işi* deyilir. Əgər bu enerjini keçirici zonanın dibindən hesablasaq elektronu keçirici zonanın dibindən E_{vak} səviyyəsinə keçirmək üçün lazım olan enerjiyə *həqiqi çixış işi* (χ_0) deyilir:

$$\chi_0 = E_{vak} - E_c,$$

burada E_{vak} - sərbəst elektronun vakuumdakı enerjisidir. Əgər hesablamada Fermi səviyyəsindən aparılırsa bu çixış işi *termodinamik çixış işi* (Φ) adlanır.



Şəkil 6.2. Bərk cismin vakuulla sərhəddinin enerji diaqramı

$$\Phi = \chi_0 + E_c - F = E_{vak} - F$$

χ_0 - çixış işi kristal qəfəsinin xassələrindən asılıdır. Metallar və yarımkəçiricilər üçün bu iş 1-6 eV qiymətləri alır. Çəpəri aşmaq üçün kristala enerji istilik, şüalanma və ya başqa mənbələrdən verilə bilər. Bunlardan ən sadəsi radioelektron qurğularda geniş istifadə olunan bərk cisimlərin qızdırılması zamanı baş verən elektronların termoelektron emissiyasıdır. Hesablamalar göstərir ki, termoelektron cərəyanı termodinamik çixış işindən asılıdır:

$$j = AT^2 e^{-\frac{\Phi}{k_0 T}} \quad (6.2.1)$$

Burada

$$A = \frac{4\pi k_0^2 e m^3}{h^3}$$

Çixış işini Fermi səviyyəsindən hesablamaq daha əlverişlidir. Çünki, yarımkəçiricilərin xassələri Fermi səviyyəsinin vəziyyəti ilə təyin olunur, bu səviyyənin vəziyyəti isə öz növbəsində aşqarlardan və

temperaturdan asılıdır. Ona görə də termodinamik çıxış işi müxtəlif yarımkeçiricilər üçün müxtəlif olacaqdır.

Məsələn, məxsusi yarımkeçirici üçün

$$\Phi_i = \chi_0 + \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_c}{N_v};$$

donor yarımkeçiricilər və aşağı temperaturalar üçün

$$\Phi_i = \chi_0 + \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_c}{N_v};$$

aşqarların tam ionlaşması oblastı üçün

$$\Phi_d = \chi_0 + k_0 T \ln \frac{N_d}{N_c}$$

Akseptorlu yarımkeçirici üçün də analogi ifadələr alınır:

$$\Phi_a = \chi_0 + \Delta E + \frac{E_a - E_v}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_a}{2N_v};$$

$$\Phi_a = \chi_0 + \Delta E + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_a}{N_v}.$$

Akseptorlu yarımkeçiricidən çıxış işinin donorlu yarımkeçiricidən çıxış işindən fərqi ΔE -dən böyük deyildir.

Hər bir bərk cismin sərhəddində enerji çəpəri mövcud olduğundan iki bərk cismin kontaktı zamanı bu çəpərlərlə bağlı **kontakt potensialları** fərqi yaranır. Məsələn iki metalın kontaktına baxaq. Əgər bu metallar arasında bilavasitə kontakt yoxdursa, metallar arasında yalnız termoelektron emissiyası nəticəsində elektron mübadiləsi baş verə bilər. Onda metalı tərk edən elektronların sayı onların bu metallardan çıxış işindən asılıdır. Birinci metaldan çıxış işi ikinci metaldan çıxış işindən kiçik olarsa, (6.2.1) tənliyinə əsasən birinci metaldan axan cərəyan ikinci metalın kontaktyanı oblastı müsbət, ikinci metalın kontaktyanı oblastı isə mənfi işarəli yüklə yüklənəcəkdir.

Müsbət və mənfi yüklərin belə ayrılması φ_k kontakt potensialları fərqi yaranmasına səbəb olur. Proses termodinamik tarazlıq yaranana qədər, yəni $\bar{J}_{10} = \bar{J}_{20}$ olana qədər davam etdiyindən (6.2.1) düsturuna əsasən φ_k -ni tapmaq olar.

$$AT^2 e^{\frac{\Phi_1}{k_0 T}} = AT^2 e^{\frac{\Phi_2 + e\varphi_k}{k_0 T}}, \quad (6.2.2)$$

$$\varphi_k = \frac{\Phi_1 - \Phi_2}{e}, \quad (6.2.3)$$

φ_k - **xarici kontakt potensialları fərqi** adlanır. (6.2.3) tənliyindən göründüyü kimi φ_k termodinamik çıxış işlərinin fərqi kimi təyin olunur (şəkil 6.3).

Qeyd edək ki, vakuum aralıq kifayət qədər böyük olarsa, kontakt sahəsinin nüfuz etdiyi dərinlik (6.1.12) ekranlanma məsafəsi ilə təyin olunacaqdır.

Sadə hesablamalar göstərir ki, çıxış işlərinin fərqi $\Phi_2 - \Phi_1 = 1eV$ olduqda bu $d = 1 \text{ sm}$ aralıq məsafəsinə uyğun gəlir.

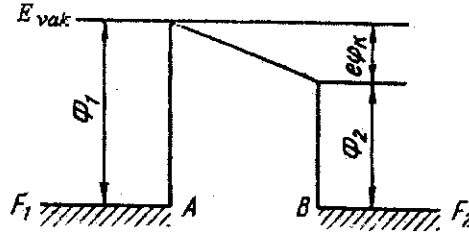
Əgər metalların bilavasitə kontaktını yaratsaq, yuxarıdakı mülahizələrə analogi yolla φ_i daxili kontakt potensiallar fərqi anlayışına gələrik. Daxili

kontakt potensiallar fərqi qiyətini termodinamik tarazlıq halında cərəyanların və enerjilərin bərabərliyindən almaq olar: $E_2 = E_1 + e\varphi_i$. Buradan metallarda Fermi səviyyələrinin vəziyyətlərini nəzərə almaqla $E_1 - F_1 = E_2 - F_2 = E_1 + e\varphi_i - F_2$ alarıq və nəticədə:

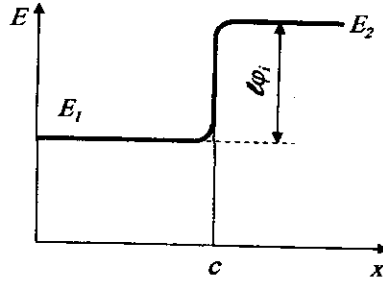
$$\varphi_i = \frac{F_2 - F_1}{e} \quad (6.2.4)$$

(6.2.4) ifadəsinə əsasən belə nəticəyə gəlmək olar ki, daxili kontakt potensiallar fərqi təcrid olunmuş metalların bir-birinə toxunmazdan əvvəl Fermi səviyyələrinin fərqi ilə təyin olunur. Metallar üçün Fermi enerjisi yükdaşıyıcıların effektiv kütləsi və onların konsentrasiyası ilə təyin olunur. Deməli φ_i də həmin

kəmiyyətlərlə təyin olunacaqdır. Müxtəlif metallar üçün elektronların konsentrasiyası və Fermi səviyyəsinin vəziyyəti çox az fərqləndiyindən, metalların daxili kontakt potensiallar fərqi adətən kiçik olub 0,001-0,01 V intervalında olur.



Şəkil 6.3. Termodinamik tarazlıq halında φ_k xarici kontakt potensiallar fərqi omələ gəlməsinin enerji diaqramı



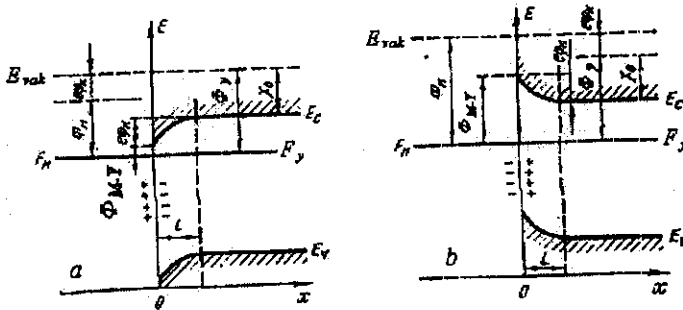
Şəkil 6.4. φ_i daxili kontakt potensiallar fərqi omələ gəlməsinin enerji diaqramı

§6.3. Metal-yarımkərici kontaktı.

Kontaktın düzləndirmə xassələri

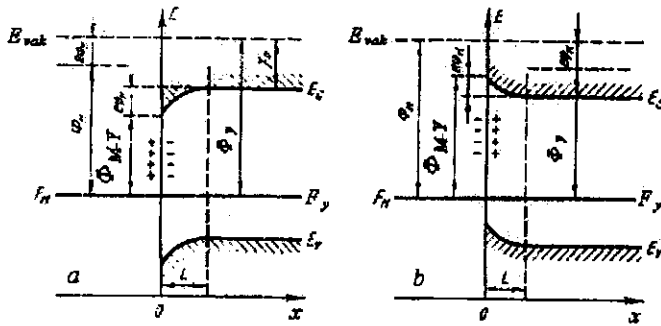
Metal-yarımkərici kontaktında kontakt potensiallar fərqi əmələ gəlməsi metal-metal kontaktındakından prinsipcə fərqlənmir, belə ki, o, metalın və yarımkəricinin çıxış işlərinin fərqi ilə təyin olunur. Lakin yarımkəricidə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının geniş intervalda dəyişməsi imkanı metal-yarımkərici kontaktında spesifik hadisələrin baş verməsinə səbəb olur.

Metal - n -tip yarımkərici kontaktına baxaq. Fərz edək ki, n -yarımkəricidən çıxış işi metaldakından böyükdür. $\Phi_Y > \Phi_M$ (şəkil 6.5,a). Onda metaldan yarımkəriciyə keçən elektronlar seli əks istiqamətdəki elektronlar selindən çox olacaqdır. Nəticədə metalın kontaktyanı oblastında müsbət, yarımkəricinin kontaktyanı oblastında isə mənfi yüklər əmələ gəlir. Məlum olduğu kimi bu $e\phi_k = \Phi_Y - \Phi_M$ kontakt potensiallar fərqi və metaldan elektronların yarımkəriciyə keçməsinə mane olan elektrik sahəsinin yaranmasına səbəb olur. (6.1.12) tənliyinə əsasən elektrik sahəsinin nüfuz etmə dərinliyi metaldakı və yarımkəricidəki elektronların konsentrasiyasından asılı olduğundan və $n_m \gg n_y$ olduğundan elektrik sahəsi praktiki olaraq yalnız yarımkəricinin dərinliyinə nüfuz edəcəkdir. Əgər həcmi yüklər mənfidirse enerji zonaları aşağıya əyiləcəkdir və yarımkəricinin kontaktyanı layı elektronlarla, başqa sözlə əsas yükdaşıyıcılarla zənginləşəcəkdir. Deməli baxdığımız halda kontakt sahəsinin təsiri ilə yarımkəricinin kontaktyanı layının elektrik keçiriciliyi artır.



Şəkil 6.5. $\Phi_Y > \Phi_M$ (a) və $\Phi_Y < \Phi_M$ (b) halları üçün metal n -tip yarımkərici kontaktının enerji diaqramı

Əgər metaldan çıxış işi yarımqeçiricidən çıxış işindən böyük ($\Phi_M > \Phi_Y$) olarsa, yarımqeçiricinin kontaktyanı layında enerji zonaları yuxarıya doğru əyləcək və bu laydeşiklərlə, yeni qeyri-əsas yükdaşıyıcılarla zənginləşəcək. Qeyri-əsas yükdaşıyıcılarla zənginləşmə isə elektrik keçiriciliyin azalması deməkdir. Kontakta termodinamik tarazlıq halında baxıldığından cırışmamış yarımqeçirici üçün $n_i^2 = n_0 p_0$ tənliyinə əsasən p_0 qeyri-əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması n_0 əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının azalması deməkdir. Onda n -tip yarımqeçiricinin $\sigma = en\mu$ kimi təyin olunan elektrik keçiriciliyi azalacaqdır. Əsas yükdaşıyıcıları tükənmiş bu böyük müqavimətli lay **bağlayıcı təbəqə** adlanır. Bunun əksinə, əsas yükdaşıyıcılarla zənginləşmiş böyük keçiricilikli lay isə **antibağlayıcı təbəqə** adlanır. Beləliklə, metal-yarımqeçirici kontaktında bağlayıcı və antibağlayıcı təbəqə yaranabilir. Onda belə kontakt ondan elektrik cərəyanı keçdikdə qeyri-xətti olacaqdır, çünki tətbiq olunan gərginlikdən asılı olaraq kontaktın xassəsi dəyişir. Analoji olaraq metal - p -yarımqeçirici kontaktında da $\Phi_Y > \Phi_M$ (şəkil 6.6) olduqda bağlayıcı (şəkil 6.6,a), $\Phi_M > \Phi_Y$ olduqda isə antibağlayıcı (şəkil 6.6,b) təbəqə yaranır.



Şəkil 6.6. $\Phi_Y > \Phi_M$ (a) və $\Phi_Y < \Phi_M$ (b) halları üçün metal p -tip yarımqeçirici kontaktının enerji diaqramı

Metal-yarımqeçirici kontaktında yaranan bağlayıcı təbəqə bu kontaktdan cərəyan keçdikdə düzləndirmə xassəsinə malik olur. Tarazlıq halında əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının qradienti nəticəsində yaranan diffuziya cərəyanı kontakt sahəsində qeyri-əsas yükdaşıyıcıların dreyf cərəyanı ilə kompensə olunur. Kontakta xarici V sahəsi tətbiq etdikdə tarazlıq pozulur və kontaktdan elektrik cərəyanı keçir. Elektrik cərəyanı üçün əsas müqavimət bağlayıcı təbəqənin müqavimətidir, ona

görə də tətbiq olunan xarici gərginliyin demək olar ki, hamısı bu təbəqədə düşür.

Xarici V gərginliyinin metal-yarımkeçirici kontaktında enerji çəpərinə təsirinə daha ətraflı baxaq. Cərəyan keçərkən yarımkeçirici tarazlıqsız hala keçir və ondakı yükdaşıyıcıların konsentrasiyası Fermi kvazisəviyyəsi ilə təyin olunur. Metal- n -tip cırışmamış yarımkeçirici kontaktı üçün $\Phi_M > \Phi_Y$ olduqda

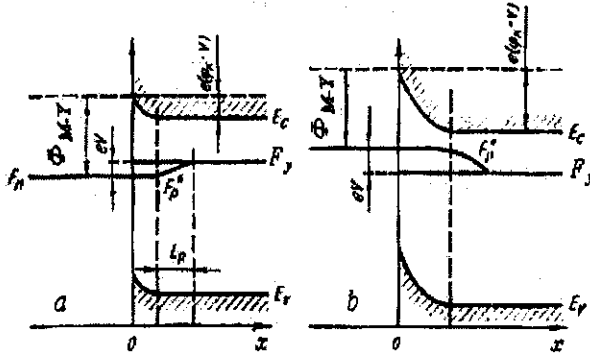
$$n = N_c e^{-\frac{E_c - F_n^* + eU(x)}{k_0 T}} \quad (6.3.1)$$

olur.

Aydındır ki, cərəyanın keçməsi yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının və Fermi kvazisəviyyəsinin dəyişməsinə səbəb olacaqdır. Göstərmək olar ki, Fermi kvazisəviyyəsinin dəyişməsi praktiki olaraq tətbiq olunan potensiallar fərqi ilə təyin olunacaqdır: $\Delta F_n^* = e(V_2 - V_1)$.

Onda tətbiq olunan xarici V gərginliyinin istiqamətindən asılı olaraq metal-yarımkeçirici kontaktında potensial çəpərin hündürlüyü ya böyüyəcək, ya da kiçiləcəkdir.

Əgər $\Phi_M > \Phi_Y$ halında n -tip yarımkeçiriciyə mənfi, metala isə müsbət gərginlik tətbiq etsək elektronların yarımkeçiricidən metala keçidi baş verər və əsas yükdaşıyıcıları tükənmiş kontaktyanı layın qalınlığı azalar (şəkil 6.7,a). Metal ilə yarımkeçirici arasındakı potensial çəpərin hündürlüyü eV qədər azalıb $e(\phi_z - V)$ -yə bərabər olar.



Şəkil 6.7. Düz (a) və əks (b) gərginlik tətbiq etdikdə metal - n -tip yarımkeçirici kontaktının enerji diaqramı

Belə gərginlik **düz (düzünə) gərginlik** adlanır: $V < 0$. Tətbiq olunan gərginliyin istiqamətini dəyişsək, yəni mənbənin müsbət qütbünü

yarımkəçiriciyə, mənfi qütbünü isə metala birləşdirsək, elektronların metal sərhəddindən yarımkəçiricinin içərilərinə doğru yerdəyişməsi baş verir və yükdaşıyıcıları tükənmiş sərhədyanı təbəqənin qalınlığı artır (şəkil 6.7,b). Nəticədə potensial çəpərin hündürlüyü artaraq $e(\varphi_k + V)$ olar.

Belə gərginliyə bağlayıcı gərginlik deyilir: $V > 0$.

Metalla p -tip yarımkəçiricinin kontaktında da analogi hadisə baş verir. Lakin bu halda yarımkəçiricini mənəbin müsbət qütbünə, metali isə mənfi qütbünə birləşdirdikdə düzünə gərginlik alınır.

Beləliklə, əgər metal-yarımkəçirici kontaktında bağlayıcı təbəqə emələ gəlsə və xarici gərginlik kontaktyanı təbəqədə qeyri-əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını artırırsa, yəni əsas yükdaşıyıcıları tükənmiş layın qalınlığını artırırsa və ona görə də kontaktın müqaviməti artarsa onda belə kontaktın axan cərəyan çox cüzi olacaqdır. Əgər bu layda qeyri-əsas yüklərin konsentrasiyası azalarsa metal-yarımkəçirici kontaktından axan cərəyan artır. Metal-yarımkəçirici kontaktında bağlayıcı təbəqənin mövcudluğu və onun qalınlığının xarici gərginlik vasitəsilə idarə olunması kontaktın düzləndirmə xassəsini təmin edir (şəkil 6.8).

Bu halda bağlayıcı təbəqənin qalınlığı aşağıdakı düsturla təyin olunur:

$$\xi = \sqrt{[2\epsilon\epsilon_0(\varphi_k + V)]/(en_0)} \quad (6.3.2)$$

(6.3.2) ifadəsindən görünür ki, düzünə gərginlikdə $V < 0$ bağlayıcı təbəqənin qalınlığı azalır, əks (bağlayıcı) gərginlikdə $V > 0$ isə artır. Xarici gərginlik tətbiq etdikdə metaldan yarımkəçiriciyə axan cərəyanı j_Y və əksinə axan cərəyanı j_M hesablamaqla metal-yarımkəçirici kontaktı üçün voltamper xarakteristikasının (VAX) analitik ifadəsini almaq olar. Kontakta xarici gərginlik tətbiq etdikdə yekun cərəyan $j = j_Y - j_M$ olduğundan (6.2.2) və (6.2.3) ifadələrinə əsasən alırıq:

$$j = AT^2 e^{\frac{e\varphi_k + eV}{k_0T}} - AT^2 e^{\frac{e\varphi_k}{k_0T}} = j_S \left(e^{\frac{eV}{k_0T}} - 1 \right) \quad (6.3.3)$$

Burada $j_S = AT^2 e^{\frac{e\varphi_k}{k_0T}}$ - doyma cərəyanı adlanır. (6.3.3) ifadəsindən görünür ki, kontakta düzünə gərginlik $V < 0$ tətbiq etdikdə cərəyan j eksponensial qanunla artır, kontakta əks gərginlik $V > 0$ tətbiq etdikdə isə j doyma cərəyanı j_S -lə təyin olunur.

Metal-yarımkəçirici kontaktının VAX-nın daha dəqiq çıxarılışı göstərir ki, bağlayıcı təbəqənin xarakteristikalarını, xüsusilə də onun qalınlığını nəzərə almaq vacibdir. Əgər bağlayıcı təbəqə qalındırsa, yəni $\xi \gg \lambda$ şərti ödənilirsə (λ -sərbəst yolun uzunluğudur), yükdaşıyıcıların bağlayıcı təbəqədə hərəkəti əsasən diffuziya ilə təsvir olunur. Ona görə

də bu nəzəriyyə diffuziya nəzəriyyəsi adlanır. Bu nəzəriyyə yükdaşıyıcılarının konsentrasiyası və yürüklüyü kiçik və bağlayıcı təbəqəsinin qalınlığı böyük olan yarımkeçiricilər üçün ödənilir. Göstərmək olar ki, diffuziya nəzəriyyəsinin tətbiq olunmasının daha dəqiq şərti $\frac{k_0T}{2eU_k\lambda} \gg 1$ şəklindədir. Bu şərtin ödənilməsi üçün kontakt

sahəsində sərbəst yolun uzunluğunda yükdaşıyıcıların qazandığı enerjisi orta istilik enerjisindən xeyli böyük olmalıdır. Bu nəzəriyyə yükdaşıyıcılarının konsentrasiyası və yürüklüyü böyük olan Ge, Si kimi yarımkeçiricilər və bir çox $A^{II}B^{VI}$ və $A^{III}B^{VI}$ birləşmələri üçün ödənilir.

$\epsilon < \lambda$ və yaxud $\frac{k_0T}{2eU_k\lambda} < 1$ şərti ödənilən belə yarımkeçiricilər üçün diod

nəzəriyyəsindən istifadə edilir. Bu halda bağlayıcı təbəqənin qalınlığı sərbəst yolun uzunluğundan kiçik olur və yükdaşıyıcılar bağlayıcı təbəqədən toqquşmaya uğramadan (səpilməyərək) keçirlər.

Bu proses vakuum diodlarında elektronların hərəkətinə oxşadığına görə nazik bağlayıcı təbəqə nəzəriyyəsi diod nəzəriyyəsi adlanır. Hər iki nəzəriyyədə VAX-nın tənliyi daha ümumi (6.3.3) ifadəsinə oxşayır.

Diffuziya nəzəriyyəsinə əsasən - VAX:

$$\vec{j} = en_s\mu_n\vec{E}_0 \left(e^{\frac{eV}{k_0T}} - 1 \right) \quad (6.3.4)$$

tənliyi ilə ifadə olunur. Burada

$\vec{j}_S = -en_s\mu_n\vec{E}_0$ - oyma cərəyanıdır.

Göründüyü kimi j_S - bağlayıcı təbəqənin xarici sərhəddindəki yükdaşıyıcıların n_s konsentrasiyası və bağlayıcı təbəqədəki

$E_0 = \frac{2e(\phi_k + V)}{\epsilon}$ sahə intensivliyi

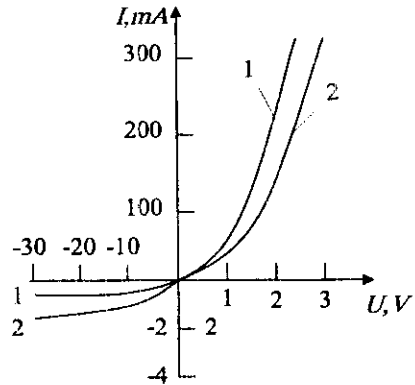
ilə təyin olunur.

Diod nəzəriyyəsinə isə VAX-nın ifadəsi aşağıdakı şəkildə olur:

$$\vec{j} = \frac{1}{4}en_s\vec{v}_i \left(e^{\frac{eV}{k_0T}} - 1 \right) \quad (6.3.5)$$

Burada $\vec{j}_S = -\frac{1}{4}en_s\vec{v}_i$ - doyma

cərəyanıdır. Bu halda j_S - yenə də n_s və yükdaşıyıcıların istilik hərəkə-



Şəkil 6.8. Nazik (1) və qalın (2) bağlayıcı təbəqə üçün metal-yarımkeçirici kontaktın voltamper xarakteristikası

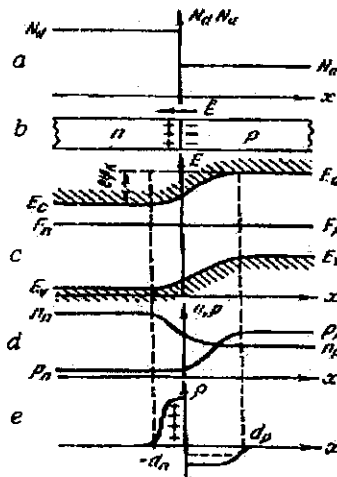
tinin orta sürəti $v_i = \sqrt{\frac{8k_0T}{\pi m}}$ ilə təyin olunur.

Göründüyü kimi diod nəzəriyyəsindəki doyma cərəyanı diffuziya nəzəriyyəsindəki doyma cərəyanından bir qədər fərqlənir. Diod nəzəriyyəsindəki \bar{j}_s doyma cərəyanı bağlayıcı təbəqədə tətbiq olunmuş gərginlikdən asılı deyildir. Lakin diffuziya nəzəriyyəsindəki \bar{j}_s doyma cərəyanı əks gərginlik artdıqca artır. Bundan başqa nazik bağlayıcı təbəqədə doyma cərəyanı qalın bağlayıcı təbəqədəki doyma cərəyanından $\frac{\bar{v}_i}{\bar{v}_d}$ dəfə böyükdür (\bar{v}_d - yükdaşıyıcıların dreyf sürətidir).

Doyma cərəyanları üçün yuxarıda göstərdiyimiz fərqlərə görə nazik bağlayıcı təbəqənin VAX-nın asimmetrikiyi daha kəskindir (şəkil 6.8).

§6.4. Yarımkəçiricilərdə elektron-deşik keçidi

Praktiki baxımdan müxtəlif tip keçiriciliyə malik yarımkəçiricilər arasındakı kontakt daha böyük əhəmiyyət kəsb edir. p -tip yarımkəçirici ilə n -tip yarımkəçiricinin kontaktı zamanı onlar arasındakı keçid oblastına elektron-deşik keçidi və yaxud $p-n$ keçid deyilir. Aydındır ki, belə keçid də düzləndirmə xassəsinə malik olacaqdır. $p-n$ keçidə xarici gərginlik tətbiq etməklə keçiddəki potensial çəpərin hündürlüyünü dəyişmək, beləliklə də həm $p-n$ keçid oblastında, həm də yarımkəçiricilərin həcmində əsas və qeyri-əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını dəyişmək olar. Məsələn, n -oblasta mənfi gərginlik tətbiq etsək



Şəkil 6.9

p -tip yarımkəçiriciyə donor aşqarları vurduqda $p-n$ keçidin əmələ gəlməsi: a - aşqarların paylanması; b - kontaktın n - və p - hissələrində yüklərin ayrılması; c - $p-n$ keçid oblastında zonalarnın əyilməsi; d - yükdaşıyıcıların paylanması; e - həcmi yüklərin paylanması.

qeyri-əsas yükdaşıyıcıların p -tip yarımqeçiricinin həcminə inyeksiyası baş verir. Bütövlükdə yarımqeçiricilər elektronikasına bu hadisəyə – yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsinə əsaslanır. p - n keçid almaq üçün n -tip və yaxud p -tip yarımqeçiriciyə örtmə və ya diffuziya üsulu ilə əks tip keçiricilik yaradan aşqarlar daxil edilir. Beləliklə, yarımqeçiricinin bir hissəsində müsbət işarəli, digər hissəsində isə mənfi işarəli yükdaşıyıcıların artıqlığı baş verir.

Bircinsli yarımqeçiriciyə donor və akseptor aşqarlarının diffuziyası yolu ilə alınan p - n keçiddə baş verən proseslərə baxaq (şəkil 6.9). Sadəlik üçün akseptor aşqarları müntəzəm paylanmış p -tip yarımqeçirici götürək. Fərz edək ki, bu yarımqeçiricinin bir hissəsinə donor aşqarları daxil edilir və bu zaman $N_d > N_a$ şərti ödənilir (şəkil 6.9, a). Onda yarımqeçiricinin bu hissəsi n -tip, qalan hissəsi isə p -tip keçiriciliyə malik olacaqdır (şəkil 6.9,b). Yarımqeçiricinin n və p – tip keçiriciliyə malik olan oblastlarının sərhəddində əsas yükdaşıyıcıların qarşılıqlı diffuziyası baş verir: Deşiklər p - hissədən n -hissəyə, elektronlar isə n -hissədən p -hissəyə keçəcəklər. Yükdaşıyıcıların belə qarşılıqlı diffuziyası p - n keçidin kontaktyanı təbəqəsində yüklərin ayrılmasına səbəb olur: p -hissədə deşiklərin bu hissədən getməsi nəticəsində akseptor ionlarının mənfi həcmi yükləri, n -hissədə isə elektronların bu hissədən getməsi nəticəsində donorların müsbət həcmi yükləri əmələ gəlir. Beləliklə, kontaktda qeyri-əsas yükdaşıyıcıların dreyfinə səbəb olan elektrik sahəsi yaranır: bu sahənin təsiri ilə deşiklər n -hissədən p -hissəyə, elektronlar isə p -hissədən n -hissəyə keçirlər.

Yükdaşıyıcıların axını qeyri-əsas yükdaşıyıcıların dreyf cərəyanı əsas yükdaşıyıcıların diffuziya cərəyanına bərabər olana qədər davam edəcəkdir. n -hissədə əsas yükdaşıyıcıların n_n konsentrasiyası p -hissədə qeyri-əsas yükdaşıyıcıların n_p konsentrasiyasından çox böyük, p -hissədə əsas yükdaşıyıcıların p_p konsentrasiyası n -hissədə qeyri-əsas yükdaşıyıcıların p_n konsentrasiyasından çox böyükdür (şəkil 6.9,c). Bundan başqa $N_d > N_a$ şərtini nəzərə alsaq $n_n > p_p$.

Yaranan kontakt sahəsi elektronların n -hissədən p -hissəyə, və deşiklərin p -hissədən n -hissəyə keçidinin qarşısını alır. Elektronların n_n konsentrasiyası və deşiklərin p_p konsentrasiyası kontaktyanı oblasta yaxınlaşdıqca sürətlə azalır (şəkil 6.9,d). Termodinamik tarazlıq halında p - n keçiddən cərəyan axmır və hər iki hissə üçün Fermi səviyyəsi eynidir.

Lakin $p - n$ keçidin hər iki tərəfində əsas yükdaşıyıcılara nisbətən əks işarəli həcmi yüklərin olması əsas yükdaşıyıcılar üçün potensial çəpərin əmələ gəlməsinə səbəb olur. Ona görə də kontakt sahəsi yaranan oblastda enerji səviyyələri əyilir (şəkil 6.9,c). Həcmi yüklər layının n və p -oblastlarda qalınlığı müxtəlif olur (şəkil 6.9,e), çünki bu qalınlıq (6.3.2) düsturuna əsasən əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyası ilə təyin olunur. Baxdığımız halda $n_n > p_p$ olduğunu nəzərə alsaq $\xi_p > \xi_n$ olduğunu görürük.

Kontakt sahəsinin $p - n$ keçidin hər iki hissəsinə daxil olma dərinliyini təyin etmək üçün Puasson tənliyini həll etmək lazımdır. Hər bir hissə üçün $\rho = en_0$ şərtini qəbul etsək alarıq:

$$0 < x < \xi_n \text{ üçün } \frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{en_n}{\varepsilon\varepsilon_0} \quad (6.4.1)$$

$$-\xi_p < x < 0 \text{ üçün } \frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{ep_p}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (6.4.2)$$

$$x = \xi_n \text{ olduqda } \varphi = 0 \text{ və } \frac{d\varphi}{dx} = 0,$$

$$x = -\xi_p \text{ olduqda } \varphi = \varphi_k \text{ və } \frac{d\varphi}{dx} = 0$$

sərhəd şərtləri daxilində (6.4.1) və (6.4.2) tənliklərinin həlli aşağıdakı şəkildə olar:

$$0 < x < \xi_n \text{ olduqda } \varphi_n = \frac{en_n}{2\varepsilon\varepsilon_0} (\xi_n - x)^2 \quad (6.4.3)$$

$$-\xi_p < x < 0 \text{ olduqda } \varphi_p = \frac{\varphi_k - ep_p}{2\varepsilon\varepsilon_0} (\xi_p + x)^2 \quad (6.4.4)$$

Aydındır ki, $x = 0$ sərhəddində (6.4.3) və (6.4.4) həlləri φ və $\frac{d\varphi}{dx}$ üçün eyni olmalıdır, yəni:

$$\varphi_n|_{x=0} = \varphi_p|_{x=0}; \quad \left. \frac{d\varphi_n}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\varphi_p}{dx} \right|_{x=0} \quad (6.4.5)$$

(6.4.3) -- (6.4.5) şərtlərini nəzərə alsaq:

$$\frac{\xi_n}{\xi_p} = \frac{p_p}{n_n} \quad (6.4.6)$$

Potensial üçün (6.4.5) şərtindən və (6.4.6) münasibətindən istifadə etməklə həcmi yüklər layının tam qalınlığı $\xi = \xi_p + \xi_n$ üçün ifadəni almaq olar:

$$\varphi_k = \frac{e}{2\varepsilon\varepsilon_0} (n_n \xi_n^2 + p_p \xi_p^2) = \frac{en_n p_p \xi^2}{2\varepsilon\varepsilon_0 (n_n + p_p)},$$

buradan isə:

$$\xi = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_0\varphi_k(n_n + p_p)}{en_n p_p}} \quad (6.4.7)$$

(6.4.7) düsturundan görünür ki, yükdaşıyıcıların konsentrasiyası kiçik olduqca həcmi yüklər layının qalınlığı böyük olar. Yükdaşıyıcıların konsentrasiyası yarımkeçiricidəki aşqarların konsentrasiyası ilə təyin olunduğundan, aşqarların konsentrasiyası artdıqca ξ azalacaqdır.

$p-n$ keçiddə kontakt potensiallar fərqi metal-yarımkeçirici kontaktında olduğu kimi çıxış işlərinin fərqi ilə təyin olunur: $e\varphi_k = \Phi_n - \Phi_p$. Donorlu və akseptorlu yarımkeçiricilər üçün Φ_n və Φ_p -nin qiymətlərini nəzərə alsaq alarıq:

$$e\varphi_k = \Delta E - k_0 T \ln\left(\frac{N_c N_v}{N_a N_d}\right).$$

Buradan alınır ki, cırlaşmamış yarımkeçirici üçün $e\varphi_k < \Delta E$. Əgər

$$np = n_i^2 = N_v N_c e^{-\frac{E_v - E_c}{k_0 T}} = N_v N_c e^{-\frac{\Delta E}{k_0 T}} \text{ olduğunu nəzərə alsaq:}$$

$$e\varphi_k = k_0 T \ln \frac{p_p N_n}{n_i^2}.$$

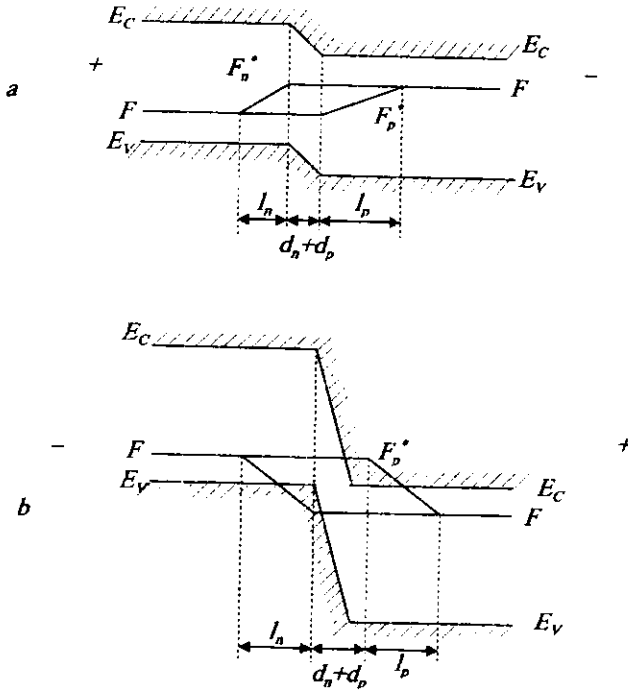
§6.5. $p-n$ keçidin voltamper xarakteristikası

$p-n$ keçiddə əsas yükdaşıyıcılar üçün potensial çəpərin mövcud olması nəticəsində $p-n$ keçidə xarici gərginlik tətbiq etdikdə düzləndirmə hadisəsi baş verir. Lakin metal-yarımkeçirici kontaktından fərqli olaraq $p-n$ keçiddə düzləndirmə əsasən kontaktyanı oblastda yaranan qeyri-əsas yükdaşıyıcılar hesabına olur. Ona görə də düzləndirmə qeyri-əsas yükdaşıyıcıların $p-n$ keçiddə generasiya və rekombinasiya şəraitindən asılıdır. Qeyri-əsas yükdaşıyıcıların generasiyası əsas yükdaşıyıcıların ilkin diffuziyası ilə əlaqədar olub onların konsentrasiyası ilə təyin olunur. Diffuziya edən yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını xarici sahənin təsiri ilə artırmaq olar. Rekombinasiya isə əsasən qeyri əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddətindən asılıdır. Qeyri-əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddəti isə onların diffuziya məsafəsindən asılıdır. Beləliklə, rekombinasiya $p-n$ keçidin qalınlığından asılı olacaqdır. Nazik $p-n$ keçidlərdə rekombinasiya prosesi baş vermədiyindən bu keçidlərdə düzləndirmənin diod nəzəriyyəsi tətbiq olunur ($L \gg \xi$).

Əgər qalın $p-n$ keçidlərdə ($\xi \gg L$) rekombinasiya hadisəsinə baxılırsa düzləndirmənin diffuziya nəzəriyyəsindən istifadə etmək

lazımdır. Bundan başqa, metal-yarımkəçirici kontaktından fərqli olaraq $p-n$ keçiddən axan cərəyanı hesablayarkən həm elektronların, həm də dəşiklərin yaratdıqları cərəyanları nəzərə almaq lazımdır. Onda $p-n$ keçiddən axan cərəyan dörd toplanandan ibarət olur: əsas yükdaşıyıcılar olan elektronların \vec{j}_{nD} və dəşiklərin \vec{j}_{pD} diffuziya cərəyanları, qeyri əsas yükdaşıyıcıların \vec{j}_{nE} və \vec{j}_{pE} dreyf cərəyanları. Termodinamik tarazlıq halında bu dörd cərəyanın cəmi sıfıra bərabər olacaqdır.

$$\vec{j}_{nD} + \vec{j}_{pD} + \vec{j}_{nE} + \vec{j}_{pE} = 0 \quad (6.5.1)$$



Şəkil 6.10. Düz (a) və əks (b) gərginlik tətbiq etdikdə $p-n$ keçidin enerji diaqramını

Əgər $p-n$ keçidin p -hissəsinə xarici gərginlik mənbənin müsbət qütbünü, n -hissəsinə isə mənfə qütbünü birləşdirsək potensial çəpərin hündürlüyü kiçilər. Bu düzünə gərginlikdir $V < 0$. Bu zaman elektronların n -hissədən p -hissəyə seli və dəşiklərin p -hissədən n -hissəyə seli artar.

Beləliklə, $p-n$ keçidə düzünə xarici gərginlik tətbiq etdikdə əsas yükdaşıyıcıların cərəyanı artır. Bu halda xarici elektrik sahəsi kontakt sahəsindən böyük ola bilər və nəticədə potensial çəpər yox ola bilər.

Onda xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə enerji zonaları elə əyilir ki, elektronların p -hissəyə, deşiklərin isə n -hissəyə keçidi asanlaşır (şəkil 6.10,a). $p-n$ keçiddən axan cərəyanın qiyməti tətbiq olunan V gərginliyinin qiymətindən və elektronların p -hissədə, deşiklərin isə n -hissədə rekombinasiyasından asılı olacaqdır. Tətbiq olunan gərginliyin qütblərini dəyişsək xarici sahənin təsiri ilə müəhərrik elektronların və deşiklərin $p-n$ keçid oblastundan qovulması nəticəsində donör və akseptor ionlarının yaratdığı həcmi yüklər artacaqdır. $p-n$ keçiddən demək olar ki, cərəyan keçmir (şəkil 6.10,b). Bu, $p-n$ keçid üçün bağlayıcı gərginlikdir $V > 0$. Bu halda $p-n$ keçidin qalınlığı tətbiq olunan gərginliyin istiqamətindən asılı olaraq dəyişəcəkdir:

$$\xi = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0(\varphi_k + V)(n_n + p_p)}{en_n p_p}} \quad (6.5.2)$$

Düzünə gərginlikdə ($V < 0$) ξ azalır, bağlayıcı (əks) gərginlikdə ($V > 0$) isə böyüyür. Beləliklə $p-n$ keçidin keçiriciliyi asimmetrik olur, başqa sözlə, $p-n$ keçid düzləndirmə xassəsinə malikdir (şəkil 6.11).

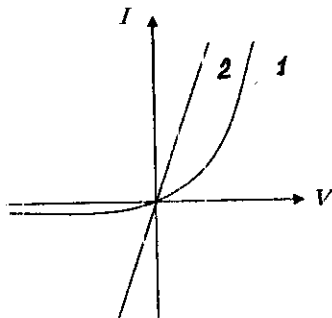
$p-n$ keçidin sərhədyanı oblastlarında əmələ gələn qeyri-əsas yükdaşıyıcıların əlavə konsentrasiyasını – n -hissə üçün Δp -ni və p -hissə üçün Δn -i hesablamaq olar:

$$\Delta p = p - p_n; \quad \Delta n = n - n_p \quad (6.5.3)$$

Burada p və n – həcmi yüklər oblastının uyğun olaraq n və p -hissələrində qeyri-əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyalarıdır. Bu konsentrasiyalar tətbiq olunan xarici V gərginliyindən asılıdır:

$$p = p_n e^{\frac{eV}{k_0 T}}; \quad n = n_p e^{\frac{eV}{k_0 T}} \quad (6.5.4)$$

Bu konsentrasiyalar düzünə $V < 0$ gərginliyi artdıqca artacaqdır. (6.5.4) ifadələrini (35)-də nəzərə alsaq:



Şəkil 6.11. $p-n$ keçidin (1) və ideal omik kontaktın (2) voltamper xarakteristikası

$$\Delta p = p_n \left(e^{\frac{eV}{k_0 T}} - 1 \right); \quad \Delta n = n_p \left(e^{-\frac{eV}{k_0 T}} - 1 \right) \quad (6.5.5)$$

Buradan görünür ki, $p-n$ keçidə düzünə gərginlik $V < 0$ tətbiq etdikdə tarazsız daşıyıcıların əlavə konsentrasiyası artır və $p-n$ keçiddən axan düz cərəyan artır. Yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının bu üsulla artırılması inyeksiya adlanır. (6.5.1) düsturuna görə $p-n$ keçiddən axan cərəyan dörd toplananla təyin olunur. Lakin müəyyən yaxınlaşma ilə bunlardan bəzilərini nəzərə almamaq olar. Aşqarların konsentrasiyası çox böyük olduqda əsas yükdaşıyıcıların n_n konsentrasiyası da böyük olur. $p-n$ keçidin sərhədyanı oblastları üçün elektroneytrallıq şərtindən ($\Delta n = \Delta p$) istifadə edərək, n -hissədə elektronların konsentrasiyası üçün yaza bilirik:

$$n = n_n + \Delta n(x)$$

Onda (6.5.1) ifadəsində elektronların diffuziya və dreyf cərəyanlarının cəmi üçün yaza bilirik:

$$\vec{j}_{nD} + \vec{j}_{nE} = eD_n \frac{dn}{dx} + en\mu_n \vec{E}$$

Hətta \vec{E} -nin kiçik qiymətlərində belə $\Delta n \ll n_n$ olduğunu nəzərə alsaq cərəyanın dreyf toplananı diffuziya toplananından böyük olur. Ona görə də diffuziya cərəyanını nəzərə almamaq olar. Onda n -oblastı üçün cərəyan $\vec{j}_{nE} = \vec{j}_n^n = en\mu_n \vec{E}$ kimi təyin olunacaqdır. p -oblastda elektronların konsentrasiyası isə $n = n_p + \Delta n'(x)$ olacaqdır. Burada $\Delta n'$ - n -oblastdan inyeksiya olunmuş elektronların konsentrasiyasıdır. n_p çox kiçik olduğundan diffuziya cərəyanı dreyf cərəyanından böyük olur:

$$\vec{j}_{nD} = \vec{j}_n^p = eD_n \frac{dn}{dx} \quad (6.5.6)$$

(6.5.5) ifadəsini nəzərə almaqla (6.5.6)-i aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$\vec{j}_n^p = \frac{eD_n n_p}{L_n} \left(e^{\frac{eV}{k_0 T}} - 1 \right) \quad (6.5.7)$$

$p-n$ keçidin nazik olduğunu, başqa sözlə, bu keçiddə rekombinasiyanın olmamasını nəzərə alsaq $p-n$ keçidin xarici sərhədlərində elektronların cərəyanları eyni olacaq: $\vec{j}_n^n|_{x=\varepsilon_n} = \vec{j}_n^p|_{x=\varepsilon_p}$. Onda hesab etmək olar ki, $p-n$ keçiddən elektronların cərəyanı (6.5.7) tənliyinin diffuziya toplananı ilə təyin olunur.

Analoji yolla p və n -oblastlarda dəşik cərəyanı da n -oblastda cərəyanın diffuziya toplananı ilə ifadə oluna bilər:

$$\bar{j}_p^n \Big|_{x=\varepsilon_p} = \frac{eD_p p_n}{L_p} \left(e^{-\frac{eV}{k_0 T}} - 1 \right) \quad (6.5.8)$$

$p-n$ keçiddən axan tam cərəyan üçün alırıq:

$$\bar{j} = \bar{j}_p^n + \bar{j}_n^p = e \left(\frac{D_p p_n}{L_p} + \frac{D_n n_p}{L_n} \right) \left(e^{-\frac{eV}{k_0 T}} - 1 \right) = \bar{j}_S \left(e^{-\frac{eV}{k_0 T}} - 1 \right) \quad (6.5.9)$$

(6.5.9) ifadəsi formaca (6.3.3)-ə oxşayır. Fərq yalnız ondadır ki, (6.5.9)-dəki doyma cərəyanı \bar{j}_S metal-yarımkeçirici kontaktındakı doyma-cərəyanından xeyli kiçik ola bilər. Bu isə $p-n$ keçidin metal-yarımkeçirici kontaktına nisbətən daha böyük asimmetrikliliyinə səbəb olur. (6.5.9) düsturundan görüldüyü kimi, düzünə gərginlik $V < 0$ tətbiq etdikdə $p-n$ keçiddən axan cərəyan eksponensial artır, əks gərginlik tətbiq etdikdə isə \bar{j}_S doyma cərəyanına yaxınlaşır. (6.5.9) düsturuna əsasən doyma cərəyanı:

$$\bar{j}_S = e \left(\frac{D_n n_p}{L_n} + \frac{D_p p_n}{L_p} \right) = e n_i^2 \left(\frac{D_n}{L_n p_p} + \frac{D_p}{L_p n_n} \right) = e \left(\frac{n_p L_n}{\tau_n} + \frac{p_n L_p}{\tau_p} \right).$$

Əsas yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və yaşama müddəti artdıqca doyma cərəyanı azalır. Temperatur artdıqca doyma cərəyanı \bar{j}_S artır, çünki bu zaman məxsusi yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır. Əslində böyük düzünə gərginliklərdə $p-n$ keçiddən axan cərəyanın gərginlikdən asılılığı sadə eksponensial qanunla təsvir olunmur. Böyük cərəyan sıxlıqlarında $p-n$ keçidin xassələrinin dəyişməsinə və generasiya-rekombinasiya mexanizminin təsirini nəzərə almaq üçün (6.5.9) düsturunun eksponentinə β əmsalı daxil edilməlidir. Ona görə də $p-n$ keçidin VAX ümumi şəkildə aşağıdakı tənliklə ifadə olunur:

$$j = j_S \left(e^{-\frac{eV}{\beta k_0 T}} - 1 \right).$$

VII FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ OPTİK VƏ FOTOELEKTRİK HADİSƏLƏR

§ 7.1. Optik əmsallar və onların kristalın dielektrik nüfuzluğu ilə əlaqəsi

Optik hadisələr dedikdə kristalla optik diapazonlu elektromaqnit dalğalarının qarşılıqlı təsiri zamanı baş verən bir sıra proseslər nəzərdə tutulur.

Əgər kristal üzərinə dalğa uzunluğu λ və intensivliyi $J(\lambda)$ olan elektromaqnit şüası düşərsə, əks olunan (qayıdan) işığın $J_R(\lambda)$ intensivliyini və yaxud nümunədən keçən işığın $J_T(\lambda)$ intensivliyini tədqiq etməklə işığın təsiri ilə kristalda baş verən prosesləri öyrənmək olar. $J_R(\lambda)$ və $J_T(\lambda)$ asılılıqlarını xarakterizə etmək üçün aşağıdakı optik əmsallardan istifadə edilir:

1. **Qaytarma əmsalı** $R(\lambda) = \frac{J_R}{J_0}$ - kristal üzərinə düşən işığın əks olunan hissəsini göstərir, adsız kəmiyyətdir, çox vaxt faizlə ifadə olunur.

2. **Buraxma əmsalı** $T(\lambda) = \frac{J_T}{J_0}$ - kristal üzərinə düşən işığın kristaldan keçən hissəsini göstərir, adsız kəmiyyətdir, adətən faizlə ifadə olunur. Nümunədən keçən işığın J_T intensivliyini tapmaq üçün yarımkəçiricinin işıqlandırılan səthindən keçən (bu səthdən qayıtmayı nəzərə almaqla) işığın hissəsini, nümunə daxilində qarşı səthə çatan (nümunənin həcmində udulmanı nəzərə almaqla) işığın hissəsini, və nəhayət, nümunədən çıxan (qarşı səthdən daxili qayıtmayı nəzərə almaqla) işığın hissəsini bilmək lazımdır.

3. **Udulma əmsalı** $\alpha(\lambda)$ - Buger-Lambert qanunundan təyin olunur:

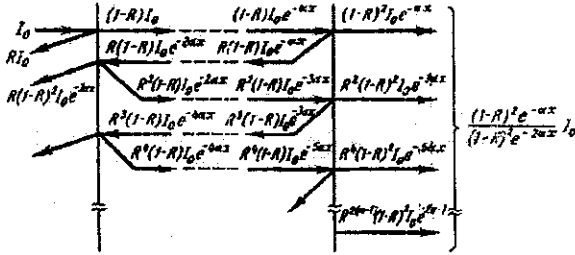
$$J_x = J_0(1 - R)e^{-\alpha x} \quad \alpha = \frac{1}{x} \ln \frac{J_0(1 - R)}{J_x} \quad (7.1.1)$$

və nümunənin vahid qalınlığında udulan işığın intensivliyini göstərir. İşığın intensivliyinin nümunənin x qalınlığında eksponensial zəifləməsi qanununa (7.1.1) əsasən α kəmiyyətini nümunənin vahid qalınlığında fotonun udulma ehtimalı kimi, α^{-1} kəmiyyətini isə fotonun nümunə daxilində sərbəst yolunun orta uzunluğu kimi mənalandırmaq olar. (7.1.1) ifadəsindəki $(1 - R)$ kəmiyyəti R qaytarma əmsalını nəzərə almaqla

işıqlandırılan səthdən keçən işığın hissəsini göstərir. Udulma əmsalının ölçüsü uzunluğun tərsi olub sm^{-1} -lə ifadə olunur.

Udulma əmsalını təyin etmək üçün nümunə üzərinə düşən işığın J_0 intensivliyini və nümunədən keçən işığın J_T intensivliyini ölçmək lazımdır. Yuxarıda göstərilən mülahizələri nəzərə almaqla J_T -ni təyin etmək üçün aşağıdakı düsturdan istifadə etmək lazımdır:

$$J_T = TJ_0 = \frac{[(1-R)^2 e^{-\alpha x}] J_0}{1 - R^2 e^{-2\alpha x}} \quad (7.1.2)$$



Şəkil 7.1. Sistemdə çoxqat əksəlmədə enerji selləri

(7.1.2) düsturunun çıxarılışını 7.1.-ci şəklə əsasən izah etmək olar. Əgər αx çox böyük olarsa, məxrəcdəki ikinci həddi atmaq olar. Onda alırıq:

$$J_T \approx (1-R)^2 J_0 e^{-\alpha x} \quad (7.1.3)$$

Buradan

$$\alpha = \frac{1}{x} \ln \frac{J_0 (1-R)^2}{J_T}$$

Əgər R əmsalı məlum deyilsə, qalınlıqları x_1 və x_2 olan iki nümunədən işığın keçməsinə (J_{T_1} və J_{T_2} -ni) ölçməklə α -nı tapmaq olar. Bu halda:

$$\alpha = \frac{\ln(J_{T_1} / J_{T_2})}{x_2 - x_1}$$

$R(\lambda), \alpha(\lambda)$ -nın dalğa uzunluğundan, $R(\omega), \alpha(\omega)$ -nın tezlikdən asılılığı və yaxud $R(\hbar\omega), \alpha(\hbar\omega)$ -nın düşən işıq kvantının enerjisindən asılılığı verilmiş yarımkeçirici üçün uyğun olaraq **qayıtma spektri** və yaxud **udulma spektri** adlanır.

İşığın həm qayıtması, həm də udulması işığın kristalla qarşılıqlı təsiri nəticəsində baş verən ümumi proseslərlə əlaqədar olduğundan onlar

bir-biri ilə əlaqəli olmalıdır. Əgər biz kompleks dielektrik nüfuzluğunu və işığın kompleks sındırma əmsalını daxil etsək bu əlaqəni anlamaq olar:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (7.1.4)$$

$$N = n - ik \quad (7.1.5)$$

Adi kəmiyyətlərdən fərqli olaraq ε və N kompleks kəmiyyətləri elektromaqnit dalğalarının işıq enerjisinin qismən udulduğu kristal mühitlə qarşılıqlı təsirini xarakterizə edir.

Sındırma əmsalı işığın vakuumdakı c sürətinin kristal mühitdəki ν sürətinə nisbəti kimi təyin olunur: $N = \frac{c}{\nu}$. Onda: $\frac{1}{\nu} = \frac{\tilde{n}}{c} - \frac{i\tilde{k}}{c}$.

(7.1.5) ifadəsini kristaldan keçən müstəvi elektromaqnit dalğasının elektrik sahəsinin $\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 e^{i\omega(t-x/\nu)}$ ifadəsində nəzərə alsaq:

$$\vec{E}(x,t) = E_0 e^{i\omega\left(t - \frac{x\tilde{n}}{c}\right)} e^{-\left(\frac{\omega\tilde{k}}{c}\right)x}$$

alınar. Buradan görünür ki, \tilde{n} kəmiyyəti adicə işığın **sındırma əmsalıdır**, \tilde{k} kəmiyyəti isə işığın kristal mühitdə udulmasını xarakterizə edir və **udulma əmsalı** və yaxud **ekstinksiya əmsalı** adlanır.

Aydınır ki, \tilde{k} və α kəmiyyətləri bir-biri ilə əlaqəli olmalıdırlar. İşığın intensivliyi elektromaqnit dalğasında elektrik sahəsi (və yaxud maqnit sahəsi) intensivliyinin kvadratı ilə mütənasibdir, onda x dərinliyində işığın intensivliyi $\exp\left[-\left(\frac{2\omega\tilde{k}}{c}\right)x\right]$ vuruğu ilə mütənasib olacaqdır. Bu isə (7.1.1) düsturunu nəzərə almaqla aşağıdakı ifadəni almağa imkan verir:

$$\alpha = \frac{2\omega\tilde{k}}{c} = \frac{2\pi\nu\tilde{k}}{c} = \frac{4\pi\tilde{k}}{\lambda} \quad (7.1.6)$$

Ümumi fizika kursundan dielektrik nüfuzluğu ilə sındırma əmsalı arasında əlaqə bizə məlumdur. Bu ifadəni kompleks kəmiyyətlər olan ε və N üçün yazaq:

$$N = \sqrt{\varepsilon} \quad (7.1.7)$$

(7.1.4) və (7.1.5) ifadələrini (7.1.7) düsturunda yerinə yazıb onun həqiqi və xəyali hissələrini müqayisə etməklə ε_1 və ε_2 kəmiyyətləri ilə \tilde{n} və \tilde{k} kəmiyyətləri arasında əlaqəni alarıq:

$$\varepsilon_1 = \tilde{n}^2 - \tilde{k}^2 \quad (7.1.8)$$

$$\varepsilon_2 = 2\tilde{n}\tilde{k} \quad (7.1.9)$$

ε_1 və ε_2 -ni keçirici mühit üçün Maksvel tənliklərindən tapmaq olar. Bunun üçün Maksvel tənliklərində işıq dalğasının dəyişən elektromaqnit sahəsində yerləşən kristalın elektrik keçiriciliyini xarakterizə edən

kompleks $\sigma(\omega)$ keçiriciliyinin qiymətini yazmaq lazımdır. $\sigma(\omega)$ -ni isə $\tau(\vec{k})$ relaksasiya müddətinə, yükdaşıyıcıların n konsentrasiyasına və keçiriciliyin m_c^* effektiv kütləsinə əsasən Bolsmanın kinetik tənliyindən tapmaq olar:

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 n}{m_c^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + i\omega\tau} \right\rangle = \frac{e^2 n}{m_c^*} \left\{ \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle - i\omega \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle \right\} \quad (7.1.10)$$

$\omega \rightarrow 0$ olduqda (7.1.10) ifadəsi limitdə bizə məlum olan aşağıdakı şəkə düşür:

$$\sigma|_{\omega \rightarrow 0} = \frac{e^2 n(\tau)}{m_c^*} \quad (7.1.11)$$

(7.1.10) və (7.1.11) ifadələrindəki m_c^* kəmiyyəti - keçiriciliyin effektiv kütləsidir. Biz görəcəyik ki, bu effektiv kütlə həm dielektrik nüfuzluğunu, həm də onun vasitəsilə bütün qalan optik sabitləri xarakterizə edir. Ona görə də m_c optik effektiv kütlə də adlanır.

Yuxarıda göstərilən qayda ilə kompleks keçiricilik vasitəsilə ε_1 və ε_2 -ni təyin etməklə alarıq:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_0 + \frac{4\pi}{\omega} \text{Im}\sigma(\omega); \quad \varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi}{\omega} \text{Re}\sigma(\omega) \quad (7.1.12)$$

Burada $\text{Im}\sigma$ və $\text{Re}\sigma$ - $\sigma(\omega)$ kompleks keçiriciliyin xəyali və həqiqi hissələri, ε_0 isə sərbəst yükdaşıyıcıları olmayan kristalın dielektrik nüfuzluğudur.

(7.1.12) düsturlarındakı ε_1 və ε_2 -ni (7.1.8) və (7.1.9) ifadələrində nəzərə almaqla n sındırma əmsalı və \vec{k} udma əmsalı ilə $\sigma(\omega)$ kompleks keçiriciliyin komponentləri arasında əlaqəni almaq olar. Əgər, dielektriklərdə olduğu kimi, $\sigma = 0$ olarsa, $\varepsilon_1 = \varepsilon_0$, $\varepsilon_2 = 0$ və

$$\tilde{n}^2 = \vec{k}^2 = \varepsilon_0; \quad 2\tilde{n}\vec{k} = 0 \quad (7.1.13)$$

olar.

(7.1.13) tənliklər sistemini həll edərək tapmaq olar ki, $n = \sqrt{\varepsilon}$, $\vec{k} = 0$, yəni material şəffaf olur. Mossun empirik qaydasına əsasən sındırma əmsalı ilə ΔE qadağan olunmuş zonanın eni arasında aşağıdakı kimi əlaqə mövcuddur: $\tilde{n}^4 \cdot \Delta E = 77$. Bu qayda $30 \leq n^4 \leq 440$ intervalındakı qiymətlər üçün doğrudur.

Düşən işığın intensivliyinin qayıdan işığın intensivliyinə nisbətini düşən və qayıdan işıq dalğalarının elektrik sahələri intensivliklərinin modullarının kvadratları nisbəti kimi götürməklə R qaytarma əmsalını \tilde{n} və \vec{k} ilə ifadə etmək olar:

$$R = \frac{(\tilde{n} - 1)^2 + \tilde{k}^2}{(\tilde{n} + 1)^2 + \tilde{k}^2} \quad (7.1.14)$$

\tilde{k} -nın (7.1.6) tənliyindəki ifadəsindən istifadə etsək görürük ki, (7.1.14) düsturu R ilə α arasında əlaqə yaradır. Əgər udulma çox az olarsa, udulma əmsalı klassik asılıqla ifadə olunur:

$$R = \frac{(\tilde{n} - 1)^2}{(\tilde{n} + 1)^2} \quad (7.1.15)$$

Sındırma əmsalının böyük qiymətlərində ($\tilde{n} \gg 1$) demək olar ki, tam udulma baş verir - $R \approx 1$. Əgər əksinə, udulma çox böyükdürsə və $\tilde{k} \gg \tilde{n}$ olarsa, onda da $R \approx 1$ olur və demək olar ki, tam qayıtma baş verir. Məhz metallarda və yarımkəçiricilərdə müşahidə olunan güzgü parıltısı bu ikinci hala uyğun gəlir, çünki bu materiallarda spektrin görünən oblastında udulma əmsalı çox böyükdür ($\alpha \geq 10^4 \text{ sm}^{-1}$).

$R(\lambda)$, $T(\lambda)$ və $\alpha(\lambda)$ optik əmsalların spektrin müxtəlif oblastlarında spektral asılılıqlarının xüsusiyyətləri işıq dalğalarının kristal mühitlə qarşılıqlı təsir mexanizmlərinin müxtəlifliyi ilə, əsasən isə kristalın işıq dalğası enerjisini udması mexanizminin müxtəlifliyi ilə izah olunur. Ona görə də optik hadisələr nəzəriyyəsi işığın udulma spektrinin təhlili istiqamətində inkişaf etmişdir. Lakin (7.1.3) ifadəsindən görüldüyü kimi α udma əmsalının böyük qiymətlərində keçən işığın intensivliyi çox kiçikdir. Ona görə də α -nı təyin etmək üçün ölçmələri çox nazik nümunələrdə aparmaq lazımdır ($\alpha \approx 10^4 \text{ sm}^{-1}$ qiyməti üçün qalınlığı $d \approx 10^{-4} \text{ sm} = 1 \text{ mkm}$ olan nümunədən istifadə etmək lazımdır). Bu halda həm nümunənin qalınlığının ölçülməsi zamanı buraxılan səhvlər hesabına, həm də nümunənin səthinin emalı keyfiyyəti hesabına baş verən təcrübi xətlər də böyükdür. Bundan başqa heç də bütün materialların nazik təbəqələri ilə işləmək mümkün olmur. Belə hallarda optik tədqiqatları udma və yaxud buraxma spektrlərini çıxarmaqla deyil, qaytarma spektrlərini çıxarmaqla aparmağa üstünlük verilməlidir. Lakin alınan spektrlərin nəzəri şərh qaytarma spektrlərindən hesablama yolu ilə udma spektrlərinə keçməyi tələb edir. Belə hesablamanı aparmaq üçün düsturlar optik əmsalların həqiqi və xəyali hissələri üçün Kramers-Kroniç münasibətləri ilə verilir. ε_1 və ε_2 üçün bu münasibətlər belədir:

$$\varepsilon_1(\omega_0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega \varepsilon_2(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}; \quad \varepsilon_2(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (7.1.16)$$

Digər optik sabitlər üçün də analogi ifadələr mövcuddur. Beləliklə, optik sabitin hər hansı bir toplananının spektrin müəyyən bir ω_0 nöqtəsindəki qiymətini hesablamaq üçün digər toplananın bütün sonsuz tezlik intervalında tam spektrini bilmək lazımdır. Lakin praktiki olaraq bütün

spektri deyil, yalnız onun ω_0 tezliyinin yaxın ətrafında olan hissəsini bilmək kifayətdir, çünki ω_0 -dan uzaq olan tezliklərdə inteqralaltı ifadə sıfıra yaxın olur.

Qayıtma spektrindən udma spektrini hesablamaq üçün qayıtma əmsalı kompleks şəkildə göstərilir:

$$r(\omega) = \sqrt{R(\omega)} e^{-i\varphi(\omega)}.$$

R -in həqiqi hissəsini təcrübəyə əsasən bilməklə Kramers-Kroniq münasibətləri vasitəsilə qayıtma əmsalının φ xəyali hissəsi, yəni qayıtma fazası hesablanır.

$$\sqrt{Re^{-i\varphi}} = \frac{\tilde{n} - i\tilde{k} - 1}{\tilde{n} - i\tilde{k} + 1}$$
 kompleks qayıtma əmsalının həqiqi və xəyali

hissələrini bərabərləşdirərək (7.1.8) düsturuna əsasən \tilde{n} və \tilde{k} -ni, (7.1.9) düsturuna əsasən ε_1 və ε_2 -ni, (7.1.6) düsturuna əsasən isə α -nı tapmaq olur. Spektral intervalın məhdud olmasına baxmayaraq belə hesablama qaydası kifayət qədər böyük əmək tələb edir. Ona görə də təcrübi nəticələrə əsasən hesablamalar aparmaq üçün kompüterdən istifadə etmək zərurəti yaranır.

§7.2. Kristallarda işığın udulmasının əsas mexanizmlərinin icmalı

Biz əvvəlki bölmədə α udulma əmsalının ehtimallı izahını vermişdik. Əgər $\alpha_i(\omega)$ kəmiyyəti hər hansı bir i -ci udulma mexanizmində ω tezlikli fotonun nümunənin vahid qalınlığında udulması ehtimallı mənasını daşıyarsa və bütün udulma mexanizmləri bir-birindən asılı olmadan təsir göstərirsə, onda tam udulma ehtimallı $\alpha(\omega) = \sum_i \alpha_i(\omega)$ kimi ifadə oluna bilər.

Beləliklə, verilmiş spektral intervalda daha çox əlavə verən, yəni daha böyük $\alpha_i(\omega)$ qiymətlərinə malik olan udulma mexanizmlərini nəzərə almaq lazımdır. Müxtəlif spektral intervallarda üstünlük təşkil edən udulma ehtimallarını seçmək olar. İşığın udulması fotonların enerjisinin kristallarda başqa enerji növlərinə çevrilməsi ilə əlaqədar olduğundan, udulma mexanizmlərinin təsnifatını aşağıdakı kimi vermək olar:

1) elektronların icazəli zonalar arasında keçidləri ilə bağlı olan **məxsusi** və ya **fundamental udulma**;

2) elektronların (və ya deşiklərin) müvafiq icazəli zonalar daxilində və ya icazəli zonaların alt zonaları arasında keçidi ilə bağlı olan **sərbəst yükdaşıyıcıların udması**;

3) elektronların (və ya dəşiklərin) icazəli zonalarla qadağan zonasında yerləşən aşqar səviyyələr arasında keçidləri ilə bağlı olan **aşqar udulması**;

4) elektronların (və ya dəşiklərin) qadağan zonadakı aşqar səviyyələr arasında keçidləri ilə bağlı olan **aşqarlararası udulma**;

5) eksiton halların əmələ gəlməsi və yaxud yox olması ilə bağlı olan **eksiton udulması**;

6) işıq dalğası enerjisinin qəfəs atomlarının rəqsləri tərəfindən udulması və bununla əlaqədar qəfəsdə yeni fononların əmələ gəlməsi ilə bağlı olan **foton udulması**;

7) işıq dalğası enerjisinin elektron-dəşik plazması tərəfindən udulması və nəticədə plazmanın daha yüksək kvant hallarına keçməsinə səbəb olan **plazma udulması**;

Qeyd etmək lazımdır ki, müxtəlif elektron (və ya dəşik) keçidləri ilə bağlı olan bütün optik udulma mexanizmləri fononların udulması və yaxud yaranması ilə müşayiət olunur. Elektron (və ya dəşik) keçidləri nəticəsində baş verən udulma prosesində fononların iştirakının vacibliyi impulsun saxlanması qanununun ödənilməsi tələbi ilə əlaqədardır. Buna səbəb odur ki, bəzi keçidlərdə elektronların (və ya dəşiklərin) böyük impuls dəyişmələri bu keçidlərdə udulan fotonların adətən kiçik impulsu hesabına baş verə bilməz, burada kifayət qədər böyük impulsa malik olan fononların iştirakı tələb olunur. Beləliklə 1-5 udulma mexanizmlərində həm elektron və dəşiklərin, həm də fononların iştirak etdiyi kombine olunmuş udulma mexanizmləri verilmişdir. 1-5 udulma mexanizmlərinə uyğun elektron keçidləri 7.2-ci və 7.3.-cü şəkillərdə göstərilmişdir. 7.2.-ci şəkildə elektron və dəşik keçidləri k -fəzasında təsvir olunur. Işığın məxsusi udulması 1 və 1a keçidləri ilə göstərilmişdir. 1 keçidləri elektronların dalğa vektorlarının cüzi dəyişməsi ilə baş verir və ona görə də **düz məxsusi udulma** adlanır. 1a keçidi elektronların dalğa vektorunun nəzərə çarpacaq dərəcədə dəyişməsi ilə baş verir (germaniumda və silisiumda bu dəyişmə Brillüen zonasının ölçüləri tərtibindədir, yəni $\Delta k \approx 10^3 \text{ sm}^{-1}$). Belə udulma **qeyri-düzünə məxsusi udulma** adlanır. Göstərdiyimiz kimi, qeyri-düzünə məxsusi udulmada mütləq fononlar iştirak edirlər. 1-1a keçidlərindən görünür ki, kvantın enerjisi $\hbar\omega_{ph} < \Delta E$ olduqda məxsusi udulma mümkün deyildir. Ona görə də

fotonların tezliyinin $\omega \leq \frac{E}{\hbar}$ qiymətlərində məxsusi udulma spektrində **məxsusi udulmanın sərhəddi** adlanan aşağı düşmə müşahidə olunur.

2, 2a, 2b, 2c, 2d (şəkil 7.2.) keçidləri icazəli zonalarda sərbəst yükdəyicilərin işıq enerjisini udması nəticəsində baş verir. 2 və 2a zonadaxili keçidləri dalğa vektorunun dəyişməsi ilə baş verir ki, bu da

fononların iştirak etməsini tələb edir. Elektronların və deşiklərin zonadaxili keçidləri üçün udulma əmsalının spektral asılılığı monoton əyri şəklindədir və belə udulma **sərbəst daşıyıcıların qeyri selektiv udması** adlanır. Əgər sərbəst daşıyıcılar işıq enerjisini udaraq bir icazəli zona daxilində keçidlər icra edərlərsə (deşiklərin valent zonasındaki alt zonalar arasında 2b, 2c, 2d keçidləri), udulma spektri bir-birini əvəz edən maksimumlar və minimumlardan ibarət olacaqdır. Belə udulma **sərbəst daşıyıcıların selektiv (seçmə) udması** adlanır. Sərbəst daşıyıcıların selektiv udması fononların iştirakı olmadan gedə bilər və düz keçid ola bilər. Tədqiqatlar göstərir ki, sərbəst daşıyıcıların udmasının təsiri spektrin infraqırmızı hissəsində çox güclənir.

7.3.-cü şəkildə lokal aşqar səviyyələrinin iştirakı ilə baş verən aşqar udulması (3, 3a, 3b, 3c keçidləri) və aşqarlar arası udulma (4 keçidi) göstərilmişdir. Bu zaman aşqarlar 3-3a keçidlərində olduğu kimi neytral haldan ionlaşmış hala və əksinə, 3b-3c keçidlərində olduğu kimi ionlaşmış haldan neytral hala keçə bilərlər. Aşqarlararası keçidlərdə də aşqar səviyyələrin yükü dəyişə bilər. Dayaz aşqar səviyyələri üçün 3-3a və 3b-3c keçidlərinin udulmaya əlavəsinin spektral oblastları bir-birindən xeyli aralı yerləşir. Bu halda 3-3a keçidlərinin udulmaya əlavəsi spektrin uzaq infraqırmızı oblastında, 3b-3c və 4 keçidlərinin udulmaya əlavəsi isə məxsusi udulma sərhəddi yaxınlığında olur. Əgər aşqar udulmasında dərin aşqar səviyyələri iştirak edərsə, belə keçidlərin əlavəsi spektrin udulma sərhəddindən sonra gələn daha uzundalğalı oblastına düşür.

Spektrin müxtəlif oblastlarında bu və ya digər udulma mexanizminin rolunu qiymətləndirərkən elektron keçidlərinin enerjilərini müqayisə etmək lazımdır.

Udulan fotonun enerjisi ilə onun dalğa uzunluğu arasında əlaqəni müəyyən etmək üçün Eynşteynin $E = \hbar\omega$ münasibətindən istifadə edək.

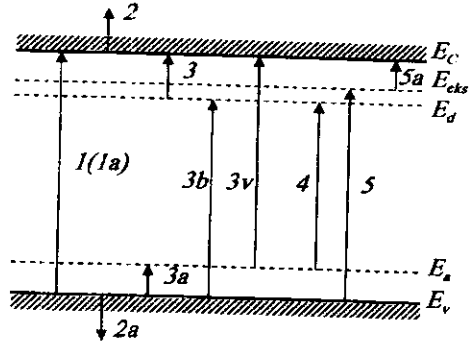
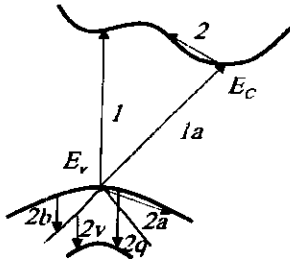
$$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} \text{ münasibətinə əsasən fotonun enerjisi üçün alırıq: } E = \frac{2\pi \hbar c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}.$$

Bu ifadədə fotonun enerjisini elektron-voltlarla, dalğa uzunluğunu mikrometrlərlə ifadə etsək müxtəlif udulma mexanizmlərinin spektral vəziyyətini qiymətləndirmək üçün əlverişli hesablama düsturu alınır:

$$E(eV) = \frac{1,24}{\lambda(m\mu m)}.$$

7.2 və 7.3-cü şəkillərdə fonon və plazma udulmalarını göstərmək mümkün deyil, çünki bu şəkillərdəki enerji səviyyələri bir elektronlu yaxınlaşmaya aiddir. Ona görə də bu diaqramlarda qəfəsin rəqs enerjisini və yaxud elektron-deşik sisteminin (plazmanın) enerjisini təsvir etmək prinsipcə mümkün deyil. 5, 5a eksiton keçidləri (şəkil 7.3) burada şərti göstərilmişdir, çünki eksiton halları məsələsi iki hissəcik – elektron və

deşik məsələsidir. Şəkilde göstərilən E_{av} səviyyəsi şərti olaraq bu cütün yalnız birinin – elektronun halını təsvir edir.



Şəkil 7.2. Optik udulmada \vec{k} fəzasında elektron keçidləri. 1-düz (birbaşa) məxsusi udulma; 1a – çöp məxsusi udulma; 2,2a – sərbəst məxsusi udulma; 2,2a – elektronlar və dəşiklər tərəfindən zonadaxili (selektiv) udulma; 2b, 2c, 2d – sərbəst dəşiklər tərəfindən selektiv udulma.

Şəkil 7.3. Optik udulmada elektron keçidlərinin sxemi. 1,1a – məxsusi udulma; 2,2a – sərbəst yükdaşıyıcılar tərəfindən udulma; 3,3a – aşqar udulması (aşqar – yaxın zona); 3b,3c – aşqar udulması (aşqar – uzaq zona); 4 – aşqarlararası udulma; 5 – eksiton udulması (eksitonun optik həyəcanlanması); 5a – eksiton udulması (eksitonların optik parçalanması).

Son üç udulma mexanizminin spektral intervallarının müqayisəsinə əsasən aşağıdakı nəticələrə gəlmək olar. Eksitonların əmələ gəlməsi (5 keçidləri) ilə əlaqədar olan eksiton udulması məxsusi udulmanın sərhəddində nəzərə çarpacaq əlavə verir, çünki eksitonun enerjisi üçün hidrogenəbənzər model əsasında aparılan hesablamalar göstərir ki, E_{av} səviyyələri dayaz səviyyələrdir.

Işıq enerjisinin qəfəsin rəqsi enerjisinə çevrilməsi ilə əlaqədar olan fonon udulması fononların enerjisinə uyğun olan spektral intervalda, yəni sərbəst yükdaşıyıcıların udulması ilə bağlı olan oblastla qismən üst-üstə düşən uzaq infraqırmızı oblastda baş verir.

Plazma udulması sərbəst yükdaşıyıcıların kifayət qədər böyük konsentrasiyalarında baş verir və plazma rezonansı adlanan vacib xüsusiyyətə malikdir. Plazma rezonansının müəyyən ətrafında udulma əmsalı çox böyük olduğundan adətən udma spektri deyil, əks olma spektri tədqiq edilir. Plazma rezonansı tezliyində plazma əks olunmasının

minimumu müşahidə olunur. Bu minimumun vəziyyəti yükdaşıyıcıların konsentrasiyası və effektiv kütləsi ilə müəyyən olunur. Müxtəlif yarımkeçiricilər üçün plazma əksolmasının minimumu spektrin yaxın və yaxud uzaq infraqırmızı oblastında kifayət qədər geniş intervalda yerləşir.

§7.3. Zonalararası keçidlər üçün udulma əmsalı. Osilyator qüvvəsi. Gətirilmiş hallar sıxlığı. Van-Hovun xüsusi nöqtələri

Göstəridiyi kimi, udulma əmsalı fotonun udulma ehtimalını təyin edir. Bu isə öz növbəsində zonalararası udulma üçün elektronların zonalararası keçid ehtimalı ilə, həm də valent zonasındakı dolu halların sayı və keçirici zonadakı boş halların sayı ilə təyin olunur. Kvant keçid nəzəriyyəsində bu faktorların nəzərə alınması udulma əmsalı üçün aşağıdakı düsturun alınmasına gətirir.

$$\alpha(\omega) = Af_{ik} g_r(\hbar\omega) \quad (7.3.1)$$

Burada A - hər hansı sabitdir; f_{ik} - dalğa vektoru \vec{k} olan haldan dalğa vektoru \vec{k}' hala keçid üçün **osilyator qüvvəsidir**; $g_r(\hbar\omega)$ - başlanğıc və son hallar üzrə gətirilmiş və ya kombinə olunmuş hallar sıxlığıdır.

Burada daxil edilmiş f_{ik} və $g(\hbar\omega)$ kəmiyyətlərinin fiziki mənasını aydınlaşdıraraq. Kvant keçidləri nəzəriyyəsində f_{ik} osilyator qüvvəsi aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

$$f_{ik} = \frac{\left[\left| \langle \vec{k}' | \vec{p} | \vec{k} \rangle \right|^2 \right]}{\left[\frac{m^*(E_k - E_{k'})}{2} \right]} \quad (7.3.2)$$

Burada kəsrin surətində elektronun başlanğıc və son hallarının dalğa funksiyalarına görə kvaziimpuls operatorunun matris elementinin modulunun kvadratı durur, məxrəcdəki E_k və $E_{k'}$ enerjisi isə elektronun başlanğıc və son hallarının enerjilərinə uyğundur.

f_{ik} osilyator qüvvəsi \vec{k} halından \vec{k}' halına keçidin W_{ik} ehtimalı ilə mütənasib olub, bu keçidin udulmaya verdiyi əlavənin hissəsini göstərir. Əgər $f_{ik} = 0$ olarsa, keçid **qadağan keçid**, $f_{ik} \neq 0$ olarsa **icazəli keçid** adlanır. $\alpha(\omega)$ kəmiyyətinin tezlik asılılığını aşkar etmək üçün osilyator qüvvəsinin enerjiden, və beləliklə də tezlikdən asılılığını bilmək lazımdır. $W_{ik}(\vec{p})$ keçid ehtimalı funksiyasını \vec{p}_0 nöqtəsi ətrafında sıraya ayıraq. Onda:

$$W_{ik}(\bar{P}) = W_{ik}(\bar{P}_0) + \left. \frac{dW}{d\bar{P}} \right|_{\bar{P}=\bar{P}_0} (\bar{P} - \bar{P}_0) + \left. \frac{1}{2} \frac{d^2W}{d\bar{P}^2} \right|_{\bar{P}=\bar{P}_0} (\bar{P} - \bar{P}_0)^2 + \dots \quad (7.3.3)$$

Əgər \bar{P}_0 nöqtəsində keçid icazəlidir, onda $W_{ik} \neq 0$ olur və \bar{P}_0 nöqtəsinin kiçik ətrafında sıfırıncı yaxınlaşma ilə kifayətlənmək olar. Onda $W_{ik}(\bar{P}) = W_{ik}(\bar{P}_0) = \text{const}$, deməli W_{ik} ilə mütənasib olan f_{ik} osilyator qüvvəsi də sabit kəmiyyət olacaqdır. İcazəli keçidlər üçün $f_{ik} = \text{const}$ alırıq.

Qadağan olunmuş keçidlər üçün \bar{P}_0 nöqtəsində keçid ehtimalı sıfıra bərabər olmalıdır: $W_{ik}(\bar{P}_0) = 0$. Onda qiymətləndirmə üçün (7.3.3) sırasının növbəti toplananını götürmək lazımdır. Onda alırıq:

$$W_{ik}(\bar{P}) \approx \left. \frac{dW}{d\bar{P}} \right|_{\bar{P}=\bar{P}_0} (\bar{P} - \bar{P}_0).$$

(7.3.2) ifadəsində osilyator qüvvəsinin kvaziimpulsdan kvadratik asılılığını nəzərə almaqla qadağan olunmuş keçidlər üçün mütənasiblik şərtini alırıq:

$$W_{ik}(\bar{P}) \sim (\bar{P} - \bar{P}_0)^2.$$

Onda osilyator qüvvəsinin \bar{P}_0 nöqtəsində qadağan olunmuş keçidləri üçün mütənasiblik şərtini alırıq:

$$f_{ik} \sim (\bar{P} - \bar{P}_0)^3.$$

Bu isə dispersiyanın parabolik qanununda osilyator qüvvəsinin enerji ilə mütənasib olan asılılığına uyğundur.

Yuxarıda alınan nəticələri birləşdirərək qısaca olaraq aşağıdakı qaydanı söyləmək olar: **icazəli keçidlərdə osilyator qüvvəsi enerjiden (həm də tezlikdən) asılı deyildir, qadağan olunmuş keçidlərdə isə osilyator qüvvəsi enerji ilə düz mütənasibdir.**

$g_s(\hbar\omega)$ gətirilmiş hallar sıxlığı kvant keçidləri nəzəriyyəsində aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$g_s(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \left(\frac{2}{\hbar^3} \right) \int \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\bar{P}, \quad (7.3.4)$$

burada E_i və E_f - elektronun başlanğıc və son hallardakı enerjiləri, $\hbar\omega$ -udulan işıq kvantının enerjisidir. δ funksiyasının tətbiqi mümkün olan bütün keçidlərdən yalnız birbaşa keçidlər üçün enerjinin saxlanması qanununu ödəyən keçidləri seçir: $E_f - E_i = \hbar\omega$. Son və başlanğıc halların enerjiləri fərqi $E = E_f - E_i$ ilə işarə edək. Onda (7.3.4) düsturunu aşağıdakı şəkildə yazmaq olar:

$$g_s(E) dE = \left(\frac{2}{\hbar^3} \right) \int d\bar{P} \quad (7.3.5)$$

Burada $G - \bar{P}$ -nin $E = \hbar\omega$ olan hallarına uyğun qiymətlər oblastıdır.

$d\bar{P}$ həcm elementini \bar{P} - fəzasında E və $E + dE$ sabit enerji səthləri arasında yerləşən müəyyən oblast kimi təsəvvür etmək olar. Onda enerjinin dE artımı üçün alırıq:

$$dE = |\nabla_p E| d\bar{P}_n, \quad (7.3.6)$$

burada $d\bar{P}_n$ -sabit enerji səthinə normal istiqamətdə \bar{P} -nin artımıdır.

Əgər $E = const$ izoenergetik səthin elementini dS -lə işarə etsək (7.3.6) ifadəsini nəzərə almaqla alırıq:

$$d\bar{P} = dS \cdot d\bar{P}_n = dS dE / |\nabla_p E|.$$

(7.3.5) ifadəsində həcm üzrə inteqrallamadan səth üzrə inteqrallamaya keçməklə alırıq:

$$g_r(E) dE = \left(\frac{2}{h^3} \right) \int dS dE / |\nabla_p E|$$

burada inteqrallama $E = \hbar\omega$ izoenergetik səth üzrə götürülür. dE -yə ixtisar edərək alırıq:

$$g_r(E) = \left[\frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \right] \int_{S_{E=\hbar\omega}} dS / |\nabla_p E| \quad (7.3.7)$$

və yaxud, ω tezliyinə keçərək yazıla bilər:

$$g_r(\hbar\omega) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \int_{S_{E=\hbar\omega}} \frac{dS}{|\nabla_p E_f - \nabla_p E_i|} \quad (7.3.8)$$

Əgər (7.3.8) ifadəsində inteqralladı funksiyanın məxrəci Brilliyen zonasının bəzi nöqtələrində sıfıra çevrilirsə, kombine olunmuş hallar sıxlığı bu nöqtələrdə müəyyən xüsusiyyətə malik olur. Bu nöqtələr Brilliyen zonasının **böhran nöqtələri** və yaxud **Van-Hovun xüsusi nöqtələri** adlanır. Xüsusi nöqtələr I növ və ya II növ ola bilər.

Brilliyen zonasının $\nabla_p E = \nabla_p E_f = \nabla_p E_i = 0$ şərtini ödəyən nöqtələri **I növ xüsusi nöqtələr** adlanır. Aydındır ki, bu nöqtələr başlanğıc və son hallar üçün dispersiya qanunlarının ekstremal nöqtələrinə uyğun gəlir. Məsələn, əgər söhbət enerjisi $\hbar\omega$ olan və $\hbar\omega = E_c - E_v$ şərtini ödəyən işıq kvantının elektronun valent zonasından keçirici zonaya keçməsinə səbəb olan zonalararası keçiddən gedirsə və E_c və E_v - keçirici zonanın və valent zonasının ekstremal nöqtələridirsə, onda belə keçid üçün kombine olunmuş hallar sıxlığı I növ xüsusiyyətə malik olacaqdır.

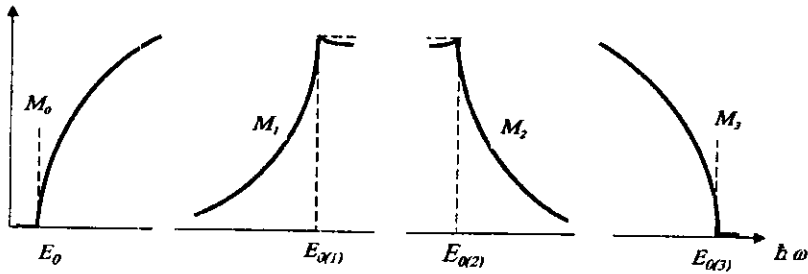
Brilliyen zonasının $\nabla_p E_f = \nabla_p E_i \neq 0$ olduqda $\nabla_p E = 0$ şərti ödənilən nöqtələrinə **II növ xüsusi nöqtələr** adlanır. II növ xüsusi nöqtələrdə \bar{k} və \bar{k}' hallarının enerjinin ekstremumlarına uyğun gəlməsi tələb olunmur, yalnız bu nöqtələrin yaxınlıklarında enerji qradientləri üst-üstə düşməlidir. Təcrübədə II növ xüsusiyyətlər I növ xüsusiyyətlərə nisbətən daha çox təsadüf edilir. Van-Hofun xüsusi nöqtələrinin təsnifatını vermək

üçün $\nabla_{\vec{P}} E = 0$ olduqda xüsusi \vec{P}_0 nöqtələri yaxınlığında $E = \hbar\omega$ enerjisini sıraya ayıraq. Onda ikinci tərtib kiçik hədd dəqiqliyi ilə yazı bilərik:

$$E(\vec{P}) = E(\vec{P}_0) + \sum_i a_i (P_i - P_{i0})^2, \quad (7.3.9)$$

burada a_i kəmiyyətləri $\frac{\partial^2 E}{\partial P_i^2}$ ilə mütənasibdirlər. Xüsusi nöqtənin tipi a_i -nin üç diaqonal komponentlərinin içindən mənfi komponentlərin sayı ilə işarə olunur. Aşağıdakı imkanlar realizə oluna bilərlər:

- 1) M xüsusi nöqtə - bütün $a_i > 0$; bu isə $E = E_{\vec{P}_0} - E_i$ enerjisinin \vec{P}_0 nöqtəsində minimumuna uyğun gəlir;
- 2) M_1 xüsusi nöqtə - $a_x, a_y > 0, a_z < 0$; bu isə E enerjisinin yastı hissəsinin nöqtəsinə uyğun gəlir;
- 3) M_2 xüsusi nöqtə - $a_x > 0, a_y, a_z < 0$; bu da E enerjisinin yastı hissəsinin nöqtəsinə uyğun gəlir;
- 4) M xüsusi nöqtə - bütün $a_i < 0$; bu isə E enerjisinin \vec{P}_0 nöqtəsində maksimumuna uyğun gəlir.



Şəkil 7.4. Böhran M_0, M_1, M_2 və M_3 nöqtələri ətrafında kombine olunmuş hallar sıxlığı funksiyasının enerjiden asılılığı

Xüsusi nöqtələr ya Brilliyen zonasının mərkəzində, ya Brilliyen zonasının sərhəddində olan yüksək simmetriyalı nöqtələrdə, və yaxud da yüksək simmetriyalı xətt boyunca müşahidə olunurlar. 7.4.-cü şəkildə dörd tip böhran nöqtə üçün (7.3.7) tənliyini ((7.3.9) düsturundan istifadə etməklə) inteqrallama yolu ilə alınmış $g_r(\hbar\omega)$ asılılıqları verilmişdir. Enerjinin $E_0 = \hbar\omega_0$ qiymətlərində müxtəlif tip böhran nöqtələrin yaxın ətrafında $g_r(\hbar\omega)$ funksional asılılıqlar 3-cü cədvəldə göstərilmiş şəkildə olur.

Cədvəldəki c kəmiyyəti tezlikdən zəif asılı olan funksiyadır. (7.3.1) tənliyində yerinə yazmaq üçün 3-cü cədvəldə göstərilən $g_r(\omega\hbar)$

funksional asılılıqlardan və f_{ik} osilyator qüvvəsinin enerjiden asılılığı üçün yuxarıda söylədiyimiz qaydadan istifadə edərək $a(\hbar\omega)$ -ın ifadəsini, yeni müxtəlif böhran nöqtələri üçün udulma əmsalının spektral asılılığını

Cədvəl 1.

$g_i(\hbar\omega)$	Xüsusi nöqtənin tipi			
	M_0	M_1	M_2	M_3
$\hbar\omega > E_0$ olan hal üçün	$\sim \sqrt{\hbar\omega - E_0}$	c	$c - \sqrt{\hbar\omega - E_0}$	0
$\hbar\omega < E_0$ olan hal üçün	0	$c - \sqrt{E_0 - \hbar\omega}$	c	$\sim \sqrt{E_0 - \hbar\omega}$

almaq olar. İcazəli keçidlər üçün f_{ik} osilyator qüvvəsinin sabitliyini nəzərə almaqla $a(\hbar\omega)$ udulma spektrinin 7.4-cü şəkildə göstərilən $g_i(\hbar\omega)$ funksiyası şəklində olduğunu görürük.

§7.4. Yarımkəçiricilərdə məxsusi udulma sərhəddinin forması. Məxsusi udulma sərhəddinə görə qadağan zonanın eninin təyini

Bundan əvvəlki bölmədə aldığımız nəticələrin köməyi ilə E_c valent zonasının və E_v keçirici zonasının ekstremumları Brillüen zonasının eyni bir nöqtəsində, məsələn $\vec{k}_0 = 0$ nöqtəsində olan yarımkəçirici üçün məxsusi udulma sərhəddini təhlil edək. Onda enerjilərin sferik zonaları baxımından yazı bilərik:

$$E = E_i - E_f = \left(E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \right) - \left(E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \right) = \Delta E + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*}. \quad (7.4.1)$$

Burada m_i^* - gətirilmiş effektiv kütlə olub, aşağıdakı kimi təyin olunur.

$$m_i^{*-1} = m_n^{*-1} + m_p^{*-1} \quad (7.4.2)$$

Zonaların sferik olduğunu fərz etdiyimizdən m_i^* - skalyar kəmiyyətdir və onun bütün komponentləri müsbətdir, yeni $E(k_0) = \Delta E$ funksiyasının ekstremal qiyməti və ekstremumu M_0 tipli xüsusi nöqtədir. Onda gətirilmiş hallar sıxlığı aşağıdakı şəkildə olar:

$$\left. \begin{array}{l} \hbar\omega > \Delta E \text{ olduqda } g_i(\hbar\omega) \sim \sqrt{\hbar\omega - E_0} = \sqrt{\hbar\omega - \Delta E}; \\ \hbar\omega < \Delta E \text{ olduqda } g_i(\hbar\omega) = 0 \end{array} \right\} \quad (7.4.3)$$

Keçidlər icazəli olarsa osilyator qüvvəsi $f_{ik} = const$ olar. Onda gətirilmiş hallar sıxlığı üçün aldığımız asılılıqları və osilyator qüvvəsini (7.3.1) ifadəsində yerinə yazaraq alırıq:

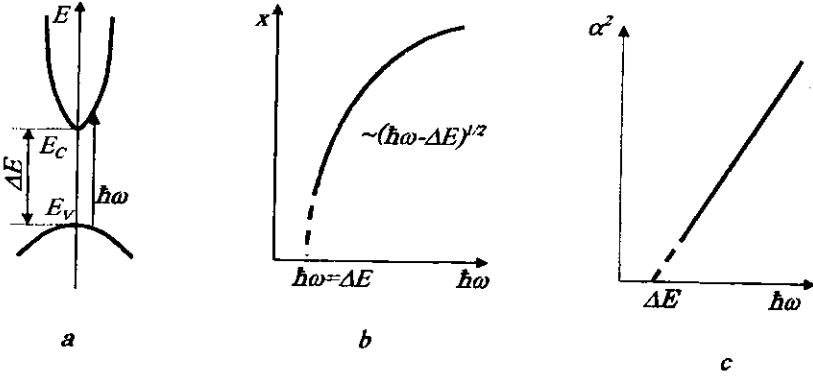
$$\alpha(\hbar\omega)_{\text{kon}} = B(\hbar\omega - \Delta E)^{\frac{1}{2}} \quad (7.4.4)$$

Burada B -hər hansı bir sabitdir.

E_0 nöqtəsində keçidlər qadağan olduqda isə osillyator qüvvəsi enerji ilə düz mütənəsb olur və onda (7.3.1) düsturuna uyğun olaraq alarıq:

$$\alpha(\hbar\omega)_{\text{qadağ}} = B'(\hbar\omega - \Delta E)^{\frac{3}{2}} \quad (7.4.5)$$

7.5-ci şəkildə düz zonalı yarımkəçirici üçün $\bar{k} = 0$ nöqtəsi ətrafında zona quruluşu, 7.5,b şəkildə isə bu yarımkəçiricinin udulma sərhəddinin forması göstərilmişdir. Burada $\frac{1}{2}$ üstlü parabolaya uyğun olan icazəli keçidlər üçün udulma sərhəddinin forması göstərilmişdir. Düzünə keçidlər üçün bizim aldığımız $\alpha(\hbar\omega)$ -nın parabolik asılılığı zonaların parabolik olması fərziyyəsinin nəticəsidir. Aydındır ki, $\alpha(\hbar\omega)$ asılılığının parabolik qanundan kənara çıxması valent zonasının və ya keçirici zonanın dispersiya qanununun qeyri-parabolik olmasını göstərəcəkdir.



Şəkil 7.5. Düz zonalı yarımkəçiricidə elektron keçidləri (a) və udulma spektrləri (b,c).

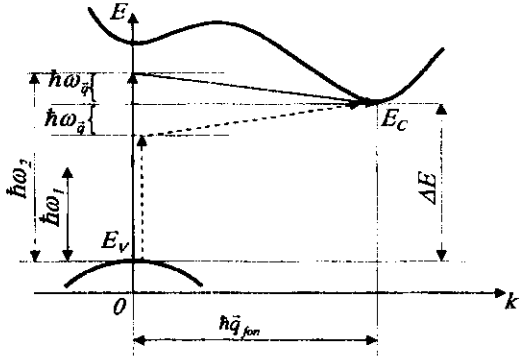
Qeyd edək ki, adi $m_n^* < m_p^*$ münasibətində $\alpha(\hbar\omega)$ funksiyası keçirici zona haqqında daha çox məlumat daşıyır. Dar zonalı yarımkəçiricilər üçün doğru olan $m_n^* \ll m_p^*$ münasibətində isə qəbul etmək olar ki, (7.4.2) münasibəti $m_n^* = m_p^*$ bərabərliyinə çevrilir və $\alpha(\hbar\omega)$ -nın parabolik qanundan kənara çıxması keçirici zonanın qeyri-parabolik olmasını sübut edir.

Düz zonalı yarımkəçiricinin udulma spektrini müşahidə etməklə udulma sərhəddi oblastında udulma əyrisini $\alpha = 0$ qiymətinə ekstrapolya-

siya edib bu yarımkeçiricinin qadağan zonasının enini təyin etmək olar. (7.4.5) ifadəsindən alınır ki, $\alpha = 0$ olduqda $\hbar\omega = \Delta E$ münasibəti doğrudur. Lakin, daha dəqiq nəticə əldə etmək üçün elə koordinatlardan istifadə etmək lazımdır ki, $\alpha(\hbar\omega)$ asılılığı düzxətli olsun. Ona görə də udulma spektrini $\alpha^2 = f(\hbar\omega)$ koordinatlarında qurmaq lazımdır. Düzüne icazəli keçidlər üçün belə asılılığı 7.5, c şəklində göstərilmişdir. Göründüyü kimi qadağan zonanın eni düzxətli asılılığın α -nın sıfır qiymətinə

ekstrapolyasiyası ilə təyin olunur. Nəzəri olaraq fotonun enerjisi $\hbar\omega < \Delta E$ olduqda udulma olmamalıdır. Lakin praktikada həm başqa növ udulma mexanizmləri hesabına, həm də ölçü xətaları hesabına müəyyən fon udulması müşahidə olunur. Ona görə də xətti ekstrapolyasiyanı $\alpha^2(\hbar\omega)$ asılılığının udulma əmsalının çox da kiçik olmayan hissəsinə görə aparmaq lazımdır.

İndi isə **qeyri-düzünə keçidlər** üçün məxsusi udulma sərhəddinin formasına baxaq (belə hal, məsələn, silisiumda və germaniumda mövcuddur). \bar{P} fəzasında zona diaqramı 7.6-cı şəkildəki kimidir. Valent zonasının ekstremumu E_v Brilliyüen zonasının mərkəzində, keçirici zonanın ekstremumu E_c isə Brilliyüen zonasının sərhədində (və yaxud sərhəddi yaxınlığında) olduğundan E_v -dən E_c -yə keçərkən elektronun kvaziimpulsunun dəyişməsi çox böyük – Brilliyüen zonası ölçüsü tərtibində olmalıdır. Udulan fotonun $P_{fon} = \hbar q$ impulsu böyük deyildir. Doğrudan da, $\hbar\omega = \Delta E = 1eV$ üçün qiymətləndirmə aparsaq alarıq ki, $q_{fon} \approx 10^4 sm^{-1}$, bu isə Brilliyüen zonasının ölçüsündən xeyli kiçikdir. Göründüyü kimi elektronların qeyri-düzünə keçidi yalnız fotonların udulması ilə baş verə bilməz, çünki bu halda impulsun saxlanması qanunu ödənilməyəcəkdir. Bu bölmənin əvvəlində göstərdiyimiz kimi baxılan halda impulsun saxlanması qanunu o zaman ödənilir ki, udulmada kifayət qədər böyük impulsa malik fononlar iştirak etsin. Onda qeyri-düz keçidlər üçün impulsun saxlanması qanunu aşağıdakı şəkli alır:



Şəkil 7.6. Aralıq virtual hallarda işığın qeyri-düz keçidlər vasitəsilə udulması prosesi. Fononların udulması ilə baş verən keçid punktilrə, fonon buraxılması ilə baş verən keçid isə bütöv oxlarla göstərilmişdir

$$\hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} = \hbar\vec{q}_{\text{fon}} \pm \hbar\vec{q}_{\text{fot}} \quad (7.4.6)$$

Fotonun çox kiçik olan impulsunu nəzərə almasaq təxmini olaraq alarıq:

$$\hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} \approx \pm \hbar\vec{q}_{\text{fon}} \quad (7.4.7)$$

(7.4.6) və (7.4.7) ifadələrindəki müsbət işarə fotonla eyni zamanda fononun da udulmasına, mənfi işarə isə fotonun udulması zamanı fononun yaranmasına uyğundur.

Qeyri-düzünə keçidlər üçün enerjinin saxlanması qanunu

$$E_f - E_i = \hbar\omega \pm \hbar\omega_q$$

şəklində olur. Burada $\hbar\omega_q$ - udulmada iştirak edən fononların enerjisidir.

İndi prosesin fononun udulması və yaxud buraxılması ilə getməsindən asılı olaraq $E_0 = \hbar\omega_0$ xüsusi nöqtəsi üçün enerjinin iki müxtəlif qiymətini alarıq. Qeyri-düzünə keçidlərdə iştirak edən hissəciklərin sayı (elektron, foton və fonon) düzünə keçidlərdə iştirak edən hissəciklərin sayından (elektron və foton) çox olduğundan, qeyri-düzünə keçidlərin ehtimalı (həm də udulma əmsalı) düzünə keçidlərin ehtimalından kiçik olmalıdır. Deyilənləri qeyri-düzünə keçid üçün 7.6-cı şəkildə göstərilən udulma prosesini şərti olaraq iki mərhələyə ayırmaqla izah etmək olar.

Birinci mərhələdə elektron foton udmaqla düzünə keçid yolu ilə valent zonasından keçirici zonadakı virtual hala keçir. İkinci mərhələdə isə elektron fonon buraxmaqla və yaxud udmaqla keçirici zonadakı virtual haldan E_c ekstremumundakı son hala keçir. Keçidin ehtimalı hallar sıxlıqlarının hasili ilə təyin olunur. Sabit enerji $\hbar\omega = E_c - E_v \pm \hbar\omega_q$ səthi üzrə inteqrallama nəticəsində qeyri-düzünə keçidlər üçün alarıq:

$$\alpha(\hbar\omega) \sim [\hbar\omega - (\Delta E \pm \hbar\omega_q)]^2,$$

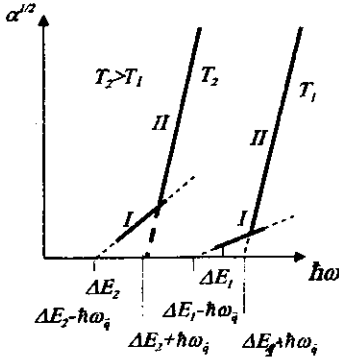
burada müsbət işarə fononun buraxılmasına, mənfi işarə isə fononun udulmasına uyğundur.

Fononun udulması ilə bağlı olan prosesin ehtimalı fononların Boze-Eynşteyn funksiyası ilə verilən sayı ilə mütənasibdir. Fononun buraxılması ilə bağlı olan prosesin ehtimalı isə fononun buraxılma ehtimalı ilə təyin olunan $1 + f_q$ funksiyası ilə mütənasibdir. Onda qeyri-düzünə icazəli keçidlər üçün udulma əmsalı aşağıdakı asılılıqla təyin olunmalıdır:

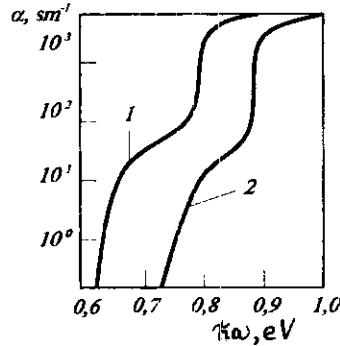
$$\alpha(\hbar\omega) = c_1 \frac{[\hbar\omega - (\Delta E - \hbar\omega_q)]^2}{e^{\hbar\omega_q/k_B T} - 1} + c_2 \frac{[\hbar\omega - (\Delta E + \hbar\omega_q)]^2}{1 - e^{-\hbar\omega_q/k_B T}} \quad (7.4.8)$$

Qeyri-düzünə icazəli keçidlər üçün $\alpha(\hbar\omega)$ asılılığını xətti şəkə salmaq üçün onu 7.7-ci şəkildə göstərilədiyi kimi $\alpha^{1/2} = f(\hbar\omega)$ koordinatlarında qurmaq lazımdır. Udulma spektri bu halda iki xətti

asilılığın cəmi kimi göstərilə bilər. Bu xətti asılılıqların $\alpha = 0$ qiymətinə ekstrapolyasiyası enerji üçün iki qiymət verir: $\hbar\omega_1 = \Delta E - \hbar\omega_q$ və $\hbar\omega_2 = \Delta E + \hbar\omega_q$. $\hbar\omega_1$ ilə $\hbar\omega_2$ -nin tən ortasında yerləşən nöqtə ΔE qadağan zonanın eninə uyğun olacaqdır. 7.7-ci şəkildə bu asılılıqlar ΔE qadağan zonanın eninin temperatur asılılığını nəzərə almaqla iki müxtəlif temperatur üçün verilmişdir. Nəzərə almaq lazımdır ki, fonon udulması ilə müşaiət olunan keçidlərin bu asılılığa verdiyi əlavə temperatur azaldıqca



Şəkil 7.7. Qeyri-düz keçidlər üçün məxsusi udulmanın sərhəddinə görə qadağan zonanın eninin və udulmada iştirak edən fononların enerjisinin təyini.



Şəkil 7.8. 300K(1) və 78K(2) temperaturda germaniumun udma spektri.

azalır. Bu tip fononlar üçün Debay temperaturundan aşağı temperaturalarda

$\left(T < \theta_D = \frac{\hbar\omega_q}{k_0} \right)$ fononların udulması ilə baş verən keçidlər praktiki olaraq

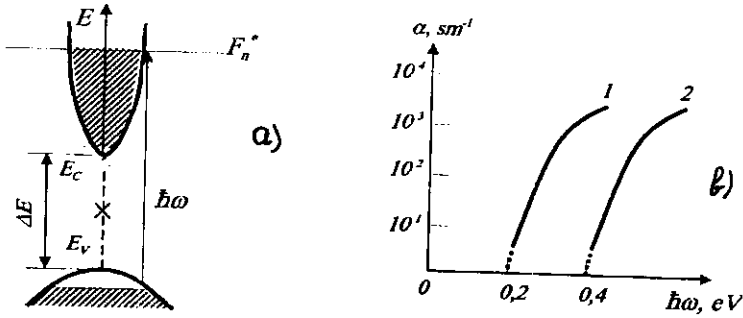
baş verməyəcəkdir, çünki fononların sayı çox az olacaqdır. Bu halda udulma, T_1 temperaturu üçün 7.7-ci şəkildə göstəriləndiyi kimi, əsasən fononların buraxılması ilə baş verən keçidlərlə əlaqədar olacaqdır. Əksinə, temperatur yüksəldikcə ($T \gg \theta_D$) fononların udulması ilə baş verən keçidlərin əlavəsi böyüyəcəkdir.

Əgər qeyri-düzünə keçidlər qadağan olunmuş olarlarsa (7.4.8) ifadəsində sürətdəki qüvvət üstü osilyator qüvvəsi hesabına bir vahid qədər artar. Onda:

$$\alpha = B_1 \frac{[\hbar\omega - (\Delta E - \hbar\omega_g)]^3}{e^{\hbar\omega_g/kT} - 1} + B_2 \frac{[\hbar\omega - (\Delta E + \hbar\omega_g)]^2}{1 - e^{-\hbar\omega_g/kT}}. \quad (7.4.9)$$

Biz qeyri-düzünə keçidlər üçün udulma zolağı sərhəddinin temperaturadan asılı olaraq sürüşdüyünü göstərdik. Aydın ki, analogi sürüşmə düzünə keçidlər üçün də mövcud olacaqdır. Nəzərə almaq lazımdır ki, qeyri-düzünə zonalı yarımkeçiricilərdə qeyri-düzünə keçidlərlə bərabər düzünə keçidlər də mümkündür. Bu zaman düzünə keçidlərin udulma əmsalı kəskin artmalıdır, çünki yalnız iki hissəciyin – elektronun və fotonun iştirakı ilə udulmanın ehtimalı artır.

7.8-ci şəkildə iki müxtəlif temperaturda germaniumun məxsusi udulma sərhəddinin spektrləri göstərilmişdir. Fotonun enerjisinin artması ilə udulma əyrilərində sınma və α -nın kəskin artması düzünə keçidlərin başlanmasına uyğundur.



Şəkil 7.9. Udma spektrində Burşteyn-Moss yerdəyişməsi: a-zona diaqramı; b-aşqarlanmamış (1) və güclü aşqarlanmış (2) nümunələr üçün udulma sərhəddi.

Temperatur sürüşməsindən əlavə udulma sərhəddinin daha bir vacib sürüşməsinin mümkünlüyünü göstərmək lazımdır. Fərz edək ki, biz zona diaqramı şəkil 7.9, a-da göstərilmiş donorlarla güclü aşqarlanmış düzünə zonalı yarımkeçiricidə udulmaya baxırıq. Onda keçirici zonadakı elektronların cırlaşması halında Fermi səviyyəsi keçirici zonaya daxil olur və Fermi səviyyəsindən aşağıdakı səviyyələr praktiki olaraq tam dolmuş olacaqdır. Enerjisi $\hbar\omega \leq \Delta E + (F - E_c)$ olan fotonların udulması nəticəsində valent zonasından elektronların keçidi qeyri mümkün olacaqdır, çünki keçirici zonadakı müvafiq səviyyələr elektronlarla artıq tutulmuşdur.

$F - E_c$ enerjisini (3.19) düsturuna əsasən hesablamaq olar. Ona görə də udulma zolağının sərhəddi daha böyük enerjili fotonlar tərəfə sürüşmüş olacaqdır. Bu sürüşmə **Burşteyn-Moss sürüşməsi** adlanır. Şəkil 7.9, b-də güclü aşqarlanmış *JnSb* üçün Burşteyn-Moss sürüşməsi göstərilmişdir.

Burşteyn – Moss sürüşməsinin böyük konsentrasiyalı aşqarların hər hansı bir xüsusi təsirinin nəticəsi deyil, icazəli zonaların sərbəst daşıyıcılarla dolmasının nəticəsi olduğunu aşqarlanmamış yarımkəçiricinin kvantının enerjisi qadağan zonanın enindən bir qədər böyük olan lazerlə şüalandırılması ilə aparılan təcrübə birbaşa sübut edir. Yarımkəçiricinin icazəli zonasında yaradıla bilən yükdaşıyıcıların ən böyük konsentrasiyası müvafiq lazerin və yarımkəçiricinin seçilməsi ilə əldə edilmişdir. Kvantının enerjisi $\hbar\omega$ olan lazer işığının intensivliyi $I(\hbar\omega)$ olsun. Onda, əgər daşıyıcıların keçirici zonada yaşama müddəti τ_n olarsa, daşıyıcıların əlavə konsentrasiyası $\Delta n = \eta I(\hbar\omega)\tau_n \alpha$ münasibəti ilə təyin olunmalıdır. Burada η - kvant çıxışıdır.

Lakin konsentrasiyanın lazer işığı intensivliyi ilə mütənəsibliyi $\hbar\omega_0 = \Delta E + (F_n^* - E_c)$ şərti ilə təyin olunan müəyyən böhran qiymətinə qədər ödənilir.

Lazer işığının intensivliyinin bundan sonrakı artmasında yarımkəçirici lazer işığı üçün şəffaf olur, yəni $\alpha(\hbar\omega)$ udulma əmsalı kəskin azalır.

§7.5. Eksiton udulması. Məxsusi udulma sərhəddində elektron-deşik qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınması

Kristalda eksiton hallarına baxarkən biz eksitonun hidrogenəbənzər modelindən istifadə etmişdik və bu hallara uyğun enerjiləri aşağıdakı düsturla qiymətləndirmişdik:

$$\Delta E_{st}^{(n)} = \frac{13,6m_{st}^*}{m\varepsilon^2\varepsilon_0 n^2},$$

burada $\Delta E_{st}^{(n)}$ (eV) enerjisi keçirici zonanın dibindən aşağıya doğru götürülmüşdür. Eksitonun yaranması üçün işıq təsiri ilə elektron valent zonasından eksiton səviyyəsinə keçməlidir, yəni udulan fotonun enerjisi aşağıdakı şərti ödəməlidir:

$$\hbar\omega = \Delta E - \Delta E_{st}^{(n)} = \Delta E - \Delta E_{st}^{(n)}(1/n^2), \text{ burada } n=1,2,3, \dots$$

Onda eksiton udulması zamanı hidrogenəbənzər xətlər seriyasından ibarət olub, məxsusi udulma sərhəddində yerləşən və $\hbar\omega = \Delta E$ enerjisinə yaxınlaşdıqca bir-birinə yaxınlaşan diskret spektr müşahidə olunmalıdır. Daha ciddi təhlil nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, diskret eksiton spektri xətlərinin intensivliyi $J_n \sim 1/n^3$ qanunu ilə azalır.

Övvəllər icazəli düzünə keçidlər üçün baxdığımız udulma spektri $\hbar\omega > \Delta E$ enerjiləri üçün $\alpha(\hbar\omega) \approx (\hbar\omega - \Delta E)^{1/2}$ asılılığını vermişdi. Qeyd edək ki, bu nəticə bir elektronlu yaxınlaşma üçün alınmışdı. Lakin işıq kvantının udulması nəticəsində bir-birinə yaxın yerləşmiş elektron-deşik cütü yaranır və bu cütdə elektronla deşiyin qarşılıqlı təsirini nəzərə almamaq olmaz. Elektron-deşik qarşılıqlı təsirində nəinki məxsusi udulma sərhəddindən kənarında diskret eksiton halları yaranır, həm də fotonun $\hbar\omega = \Delta E$ enerjisi yaxınlığında $\alpha(\hbar\omega) \sim (\hbar\omega - \Delta E)^{1/2}$ asılılığı dəyişir. Hesablamalar göstərir ki, düzünə zonalı yarımkeçiricilərdə icazəli keçidlər halında eksiton-deşik qarşılıqlı təsirini nəzərə aldıqda udulma əmsali $\alpha(\hbar\omega)$ aşağıdakı şəkildə olur:

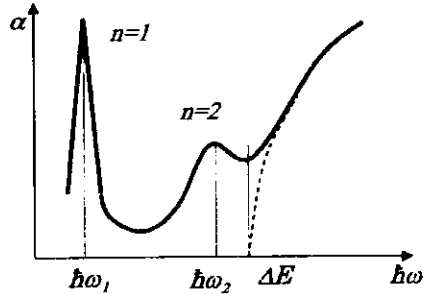
diskret spektr: $\hbar\omega < \Delta E$ və $n=1,2,3,\dots$ olduqda:

$$\alpha \sim \left\{ \hbar\omega_n - \left[\Delta E - \Delta E_{\text{st}}^{(0)} \left(\frac{1}{n^2} \right) \right] \right\}^{1/2};$$

bütöv spektr: $\hbar\omega \gg \Delta E$ olduqda $\alpha \sim (\hbar\omega - \Delta E)^{1/2}$;

$$\hbar\omega \geq \Delta E \text{ olduqda } \alpha \sim (\Delta E^{(0)})^{1/2}.$$

Müəyyən bir real düzünə zonalı yarımkeçiricidə elektron-deşik qarşılıqlı təsiri üçün udulma zolağının sərhəddi oblastında udulma spektri şəkil 7.10-da göstərilmişdir. Eksiton xəttinin nömrəsi böyük olduqca real kristallarda eksiton spektrinin diskret xətləri temperatur artdıqca daha enli olur. Belə spektrin formasını təhlil edərək qadağan zonanın enini və eksitonun rabitə enerjisini aşağıdakı kimi tapmaq olar. Eksiton xətlərinin $n=2$ və $n=1$ qiymətlərinə uyğun olan $\hbar\omega_2$ və $\hbar\omega_1$ enerjilərinin fərqi belə yazmaq olar:



Şəkil 7.10. Düz zonalı yarımkeçiricilərdə eksiton udulması spektri. Elektron-deşik qarşılıqlı təsiri nəzərə alınmadıqda udulma sərhəddi punktilə göstərilmişdir.

$$\hbar\omega_2 - \hbar\omega_1 = \Delta E_{\text{st}}^{(0)} \left(1 - \frac{1}{4} \right) = \frac{3\Delta E_{\text{st}}^{(0)}}{4}.$$

Onda eksitonun rabitə enerjisini $\Delta E_{\text{st}} = \frac{4}{3}(\hbar\omega_2 - \hbar\omega_1)$ düsturuna görə,

qadağan zonanın enini isə $\Delta E = \hbar\omega_1 + \Delta E_{\text{st}} = \frac{1}{3}(4\hbar\omega_2 - \hbar\omega_1)$ düsturuna görə

hesablamaq olar.

Qeyri-düzünə zonalı yarımkeçiricilərdə də elektron-deşik qarşılıqlı təsiri udulma sərhəddinin formasını dəyişir. Qeyri-düzünə zonalı icazəli keçidlər üçün nəzəriyyə udulma əmsalının fotonun enerjisindən asılılığı üçün aşağıdakı ifadəni verir:

diskret spektr: $\hbar\omega < \Delta E$ olduqda

$$\alpha \sim \frac{1}{n^3} \left\{ \hbar\omega - \left[\Delta E - \Delta E_{\text{ext}} \left(\frac{1}{n^2} \right) \pm \hbar\omega_q \right] \right\}^{1/2};$$

bütöv spektr: $\hbar\omega \gg \Delta E$ olduqda $\alpha \sim [\hbar\omega - (\Delta E \pm \hbar\omega_q)]^2$;

$$\hbar\omega \geq \Delta E \text{ olduqda } \alpha \sim [\hbar\omega - (\Delta E \pm \hbar\omega_q)]^{3/2}$$

Qadağan olunmuş keçidlər halında həm düzünə, həm də qeyri-düzünə keçidlər üçün eksitonun diskret xətlərinin intensivliyi $J_n \sim \frac{n^2 - 1}{n^5}$

qanunu ilə azalır, bütöv spektr oblastında da analogi asılılıq müşahidə olunur: Valent zonasının müəkkəb quruluşu malik olması və valent zonasında bir neçə alt zonaların mövcudluğu nəticəsində bir neçə eksiton seriyaları əmələ gələ bilər (valent zonasındakı alt zonaların sayına uyğun). Məsələn, bir çox $A''B''$ tip birləşmələr üçün eksiton udulma (həm də əksolma) spektrləri belə spektrlərdir. Eksitonların əmələ gəlməsində iştirak edən deşiklərin tipinə görə üç cür eksiton mövcuddur: $A-$, $B-$ və $C-$ eksitonlar. A və B seriyalı eksitonların xətləri üst-üstə düşür və əgər bu seriyaların polyarizasiya asılılığı olmasaydı onların hesablanması çox çətin olardı. Kristal üzərinə müxtəlif cür polyarlaşmış işıq saldıqda ya bütün seriyalara məxsus xətləri, ya da B və C seriyalara məxsus xətləri müşahidə etmək olar. Bu isə üst-üstə düşən A və B seriyaları ayırmağa imkan verir. Eksiton udulma və əksolma spektrlərini öyrənməklə yarımkeçiricinin zona quruluşu haqqında mühüm məlumatlar almaq olur, yəni yalnız yarımkeçiricinin qadağan zonasının enini deyil, həm də valent zonasının alt zonalarını və yükdaşıyıcıların effektiv kütləsini hesablamaq olur. Bu isə eksiton hallarının maqnit sahəsində Zeeman parçalanmasını tədqiq etməklə icazəli zonadakı yükdaşıyıcıların halını təyin edən dalğa funksiyalarının simmetriyasını tapmağa imkan verir.

§7.6. Aşqarların iştirakı ilə optik udulma. Aşqar udulması və aşqarlararası udulma

İşığın aşqar udulmasının mümkün mexanizmlərini təhlil edərkən dayaz və dərin aşqar səviyyələrinin iştirakı ilə optik udulmaların fərqləndiyini göstərmişdik. Hər hansı icazəli zonalardan birinə nisbətən optik udulmada dərin səviyyələr üstünlüyə malik deyildir və xarakterinə görə valent zonası – dərin səviyyə keçidi dərin səviyyə – keçirici zona keçidindən prinsipcə fərqlənmir. Dayaz aşqar səviyyələri biz hidrogenəbənzər modelin köməyi ilə təsvir edirdik və hidrogenəbənzər Şredinger tənliyində keçirici zonadakı elektronların xarakteristikalarından, məsələn m_* effektiv kütlədən istifadə edirdik. Aydınır ki, dayaz akseptor səviyyələri üçün hidrogenəbənzər Şredinger tənliyində valent zonasındakı dəşiklərin effektiv kütləsini yazmaq lazımdır. Aşqar səviyyələrin yarımkeçiricinin xassələrinə təsirinə baxarkən biz əsasən bu səviyyələrin energetik vəziyyətlərini qiymətləndirirdik. Optik aşqar udulmasını təsvir etmək üçün isə aşqar səviyyəsinin dalğa funksiyasını bilmək vacibdir, çünki elektronun bir haldan digər hala (məsələn, aşqar səviyyəsindən keçirici zonaya) keçməsinə bu funksiya müəyyən edir və beləliklə də udulma əmsalına təsir göstərir.

Göstəriləni kimi dayaz aşqar səviyyələrini təsvir etmək üçün hidrogenəbənzər modeldən istifadə olunur. Bu aşqar səviyyələrin iştirakı ilə udulmanı təhlil edərkən biz də həmin modeldən istifadə edəcəyik.

Dərin aşqar səviyyələr üçün müvafiq nəzəri model hələlik yoxdur. Buna görə də dərin səviyyələrin iştirakı ilə baş verən optik udulmanı izah etmək çətindir.

Dayaz aşqar səviyyələr üçün (məsələn, donorlar üçün) Şredingerin hidrogenəbənzər tənliyini həll edərək keçirici zonanın dibindən hesablanmış enerjilər (elektron-voltlarla) üçün aşağıdakı ifadəni almışıq:

$$\Delta E_d = \frac{13,6m_*^2}{m\varepsilon^2 n^2}, \text{ burada } n=1,2,3,\dots$$

Donor səviyyəsinə uyğun $\psi^d(\vec{r})$ dalğa funksiyasını keçirici zona səviyyələrinin $\psi_i^{(n)}(\vec{r})$ dalğa funksiyalarına görə sıraya ayrılması şəklində axtaraq (Valent zonasının təsirini nəzərə almamaq olar):

$$\psi^d(\vec{r}) = \sum_i A_i \psi_i^{(n)}(\vec{r}). \quad (7.6.1)$$

Hidrogenəbənzər məsələnin həllinə əsasən dalğa funksiyasının radial toplananı üçün alırıq:

$$F(\vec{r}) = (\text{const} / a^{*3/2}) e^{-r/a^*}, \quad (7.6.2)$$

burada a^* - hidrogenəbənzər aşqar səviyyəsinin effektiv Bor radiusudur.

$$a^* = \frac{a_0 m E}{m_n},$$

burada a_0 - hidrogen atomunun Bor radiusudur.

(7.6.2) və (7.6.1) tənliklərinin müqayisəsindən belə bir nəticəyə gəlmək olar ki, aşqar (donor) səviyyəsinin dalğa funksiyası koordinatlardan aşağıdakı şəkildə asılıdır:

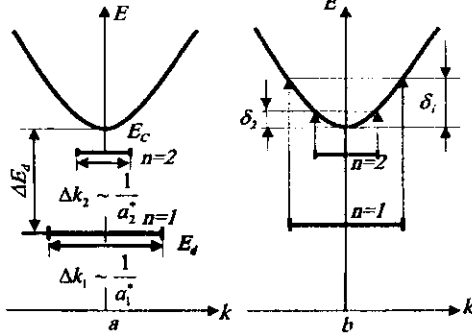
$$\psi^d(\vec{r}) \sim U_0(\vec{r})F(\vec{r}),$$

burada $U_0(\vec{r})$ -periodu qəfəs sabitinə bərabər olan hər hansı bir periodik funksiyadır.

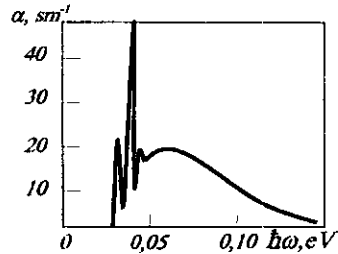
Məsələni həll edərkən biz $a^* \gg d$ (d - qəfəs sabitidir) şərti ödənildikdə tətbiq oluna bilən effektiv kütlə üsulundan istifadə etmişik.

Onda hesab etmək olar ki, $r < a^*$ şərti daxilində aşqar səviyyəsinə uyğun olan dalğa funksiyası özünü qəfəs sabitinə bərabər periodlu funksiya kimi aparır, $r > a^*$ olduqda isə (7.6.2) tənliyinə uyğun olaraq çox kiçik amplitudaya malik olur. Beləliklə, aşqar səviyyəsinin a^* effektiv Bor radiuslu sfera daxilində lokallaşmış olduğunu qəbul etmək olar.

Qeyri müəyyənlik prinsipi nəticəsində \bar{k} -fəzasında aşqar səviyyəsinin lokallaşma oblastı məhdudlaşır: $\Delta k \sim 1/2a^*$; həyəcanlanmış aşqar səviyyələrinin \bar{k} -fəzasında lokallaşma oblastı kiçiləcəkdir, çünki n baş kvant ədədi böyüdükcə onların effektiv Bor radiusları artır.



Şəkil 7.11. Aşqar udulması spektrləri: a - \bar{k} -fəzasında əsas və həyəcanlanmış hal; b - aşqar səviyyədən keçirici zonaya mümkün olan elektron keçidləri.



Şəkil 7.12. Bor aşqarlı silisiumun aşqar udulma spektri.

Onda \bar{k} -fəzasında aşqar səviyyələrini şəkil 7.11,a-da göstərilirdiyi kimi təsvir etmək olar. 7.11,b şəklində əsasən nəticəyə gəlmək olar ki, aşqar udulmasının spektri aşağıdakı quruluşa malik olmalıdır: əsas $E_j^{(1)}$

halından keçirici zonaya keçidə uyğun gələn geniş zolağın uzun dalğalı sərhəddində həyəcanlanmış səviyyədən keçirici zonaya keçidə cavab verən nisbətən ensiz zolaqlar müşahidə olunmalıdır. Təcrübə bunu təsdiq edir: 7.12-ci şəkildə Bor aşqarlı silisium üçün təcrübədən alınmış udulma spektri verilmişdir. Əsas aşqar zolağının uzundalğalı sərhəddindəki ensiz piklər Bor atomlarının həyəcanlanmış səviyyələrinin iştirakı ilə baş verən keçidlərə uyğundur. Udulma zolağı spektrin uzaq infraqırmızı oblastında yerləşir, bu isə elektron-voltun yüzdə bir hissələrini təşkil edən dayaz aşqarların ionlaşma enerjisinə uyğundur.

Əgər optik keçidlər valent zonası ilə ionlaşmış dayaz donorlar arasında və yaxud ionlaşmış akseptorla keçirici zona arasında baş verirsə belə keçidlər zamanı udulan kvantın enerjisi $\hbar\omega \geq \Delta E - \Delta E_a$ şərtini ödeməlidir. Dayaz aşqarlar üçün $\Delta E_{a,o} \ll \Delta E$ olduğundan belə aşqar udulmasının zolağı məxsusi udulmanın sərhəddi yaxınlığında yerləşərək onunla qismən üst-üstə düşməlidir. 7.13-cü şəkildə *InSb*-da aşqar-uzaq zona udulması üçün belə bir udulma spektri göstərilmişdir. 7.14-cü şəkildəki sxem ionlaşmış akseptordan keçirici zonaya elektron keçidi ilə əlaqədar olan optik udulma mexanizmi verilmişdir. ΔE və $\Delta E - \Delta E_a$ enerjiləri eyni tərtibli olduqlarından bu modeldə məxsusi və aşqar keçidlərini təmin edən udulan fotonların enerjiləri də bir-birinə yaxındır. Ona görə də məxsusi udulmanın sərhəddində aşqar udulması olan dayaz aşqar-uzaq zona keçidinə uyğun pillə əmələ gəlir.

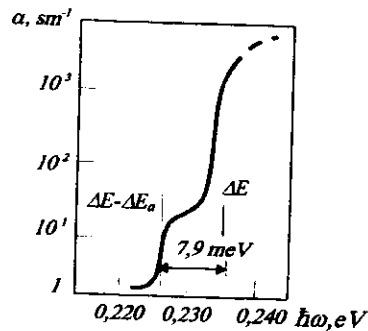
Nəzəri hesablamalar göstərir ki, ionlaşmış akseptor-keçirici zona keçidinə uyğun olan udulma üçün udulma əmsalı:

$$\alpha(\hbar\omega) \sim x^{1/2} / (1+x)^4, \quad (7.6.3)$$

kimi olur, burada: $x = m_a^* [\hbar\omega - (\Delta E - \Delta E_a)] / (\Delta E_a m_p^*)$.

Belə keçidlər üçün nəzəri udulma əyrisinin forması şəkil 7.14,b-də verilmişdir. Hesablama icazəli zonalarda elektronların və dəşiklərin kütlələri nisbətinin $\frac{m_a^*}{m_p^*} = 0,1$ qiyməti üçün aparılmışdır.

Bu aşqar zolağın maksimumu $x \approx 0,14$ -ə uyğun gəlir, yeni keçidin $\hbar\omega = \Delta E - \Delta E_a$ sərhəd enerjisi maksimumun vəziyyəti ilə deyil, zolağın uzundalğalı sərhəddinin absis oxu ilə kəsilmə nöqtəsinin vəziyyəti ilə təyin olunur.



Şəkil 7.13. 10 K temperaturda *InSb*-un aşqar udulma spektri.

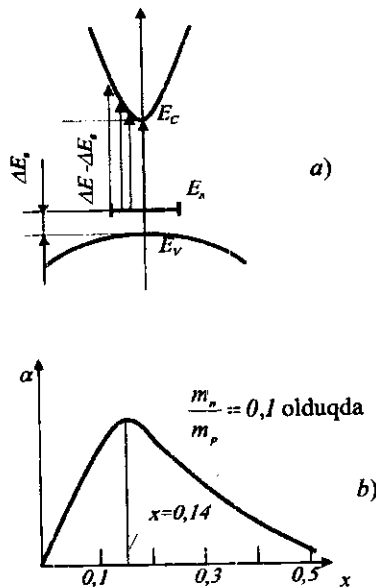
Şəkil 7.14, b-də $x=0$ olduqda, yeni $\hbar\omega = \hbar\omega_0 = \Delta E - \Delta E_a$ olduqda $\alpha=0$ olur. Düz zonalı yarımkəçiricinin udma spektri ilə (şəkil 7.13) qeyri-düz zonalı yarımkəçiricinin udma spektri (şəkil 7.8) arasında xarici oxşarlıq olduğunu göstərmək olar.

Yarımkəçiricidə eyni zamanda həm donör və həm də akseptor aşqarları mövcud olduqda onların qismən, bəzən isə tam kompensasiyası baş verir. Beləliklə hətta çox aşağı temperaturalarda belə həm donör, həm də akseptor atomları qismən (və yaxud tam) ionlaşmış olurlar. Müvafiq enerjili fotonların təsiri ilə elektronlar ionlaşmış akseptorlardan ionlaşmış donörlərə keçə bilərlər. Bu zaman hər iki aşqar neytral hala keçir. Elektronları dolmuş akseptorlar səviyyəsindən dolmamış donör səviyyəsinə keçirmək üçün lazım olan enerji yalnız donörün və akseptorların ionlaşma enerjisindən deyil, həm də onların qarşılıqlı vəziyyətindən asılıdır. Bir-birinin yaxınlığında yerləşən ionlaşmış donör ilə ionlaşmış akseptor müxtəlif işarəli yüklər cütü təşkil edir (müsbət yüklü donör və mənfi yüklü akseptor). Belə cütdə elektronun

halını xarakterizə edən enerji səviyyələrini dəyişən kulon qarşılıqlı təsiri meydana çıxır. Onda donör-akseptor cütündə elektronun akseptordan donora keçməsinə təmin edən fotonun enerjisi belə ifadə olunur:

$$\hbar\omega = \Delta E - \Delta E_a - \Delta E_a + e^2 / (\epsilon\epsilon_0 r) \quad (7.6.4)$$

Burada axırıncı hədd ionlaşmış donör - akseptor cütünün Kulon qarşılıqlı təsir enerjisidir. r - akseptorla donör arasındakı məsafədir. Donör və akseptor atomları kristal qəfəsdə istənilən kimi deyil, kristalın periodik strukturuna uyğun yerləşdiklərindən, r məsafəsi də istənilən kimi deyil, kristalın periodik strukturuna uyğun diskret dəyişəcəkdir. Statistik üsulla qəfəsdə olan aşqarların verilmiş konsentrasiyaları üçün aralarındakı məsafə (r) eyni olan donör-akseptor cütlərinin ehtimal olunan sayını



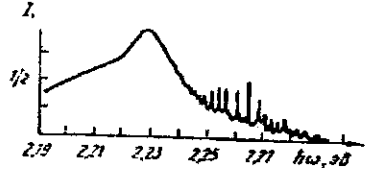
Şəkil 7.14. Optik udulmada elektron keçidləri: a-akseptor səviyyəsi-keçirici zona; b- nəzəri hesablanmış udma spektri.

hesablamaq olar. Hər bir r məsafəsinə udulan fotonun müəyyən bir enerjisi uyğun gəlir [(7.6.4) düsturuna bax].

Cütlərin komponentləri bir-birinə yaxın yerləşmiş olarsa onlar daha böyük enerjili fotonlar udur. Cütlərin komponentləri bir-birindən uzaq olduqca onların Kulon qarşılıqlı təsir enerjisi kiçik olur və cütlərin udduğu fotonun enerjisi

$\Delta E - \Delta E_0 - \Delta E_0$ qiymətinə yaxınlaşır. Aydın ki, komponentləri bir-birindən uzaqda yerləşmiş cütlərin orta sayı çox, onların uda bildikləri fotonların enerjiləri arasındakı fərq

isə kiçik olacaqdır. Ona görə də uzaqda yerləşmiş cütlərin udma xətləri kifayət qədər geniş zolaq təşkil edəcəkdir. Fotonlarla yaxın yerləşmiş cütlər arasındakı qarşılıqlı təsire uyğun udma xətləri isə udma zolağının qısdaldığı hissəsində diskret udma pikləri verəcəkdir. Ayrı-ayrı piklərin nisbi intensivliyi komponentləri arasındakı məsafənin verilmiş qiymətində donor-akseptor cütlərinin orta sayına uyğundur. Aşqarlararası diskret udulma məxsusi udulma sərhəddinə çox yaxın spektral oblasta düşür, ona görə də onu məxsusi udulma fonunda təcrübi yolla aşkar etmək çətindir. Aşqarlararası udulmanın diskret quruluşunu donor-akseptor cütlərinin komponentləri arasında şüalanma keçidləri baş verdikdə aşkar etmək olar. Yarımkəçiricilərdə işığın udulması ilə rekombinasiya şüalanması arasında qarşılıqlı uyğunluq olduğunu biz artıq göstərmişdik. Ona görə də 7.15-ci şəkildə göstərilmiş silisium və tellurla aşqarlanmış GaP -də donor-akseptor cütlərinin fotoluminesensiya spektri yuxarıda təsvir edilən udulma mexanizmini təsdiq edir.



Şəkil 7.15. Silisium və tellur aşqarlı GaP kristallarında donor-akseptor cütlərinin komponentləri arasında keçidlərə uyğun fotoluminesensiya spektri.

§7.7. Sərbəst yükdaşıyıcılarla udulma

İcazəli zonadakı halların spektri kvaziarasikəsilməz olduğundan bu zonada sərbəst yükdaşıyıcılar bir enerji halından digərinə praktiki olaraq çox cüzi təsirlə keçə bilirlər. Ona görə də zonadakı sərbəst yükdaşıyıcılar enerjisi arası kəsilmədən dəyişən fotonları uda bilirlər. Bu zaman sərbəst yükdaşıyıcıların udma spektrində struktur xüsusiyyətləri müşahidə olunmur. İdeal elektron qazının Drude-Lorens modeli əsasında qurulan klassik nəzəriyyə sərbəst yükdaşıyıcıların optik udma əmsalı üçün aşağıdakı düsturu verir:

$$\alpha(\lambda) = ne^2 \lambda^2 / [m^* 8\pi^2 \bar{n} c^3 \tau(\bar{k})], \quad (7.7.1)$$

burada n -yükdaşıyıcıların konsentrasiyası, λ -udulan fotonların dalğa uzunluğu, m^* -yükdaşıyıcının effektiv kütləsi, \tilde{n} -kristalın işığı sındırma əmsalı, c - işıq sürəti, $\tau(\vec{k})$ - yükdaşıyıcıların təsir edən səpilmə mexanizmləri ilə təyin olunan relaksasiya müddətidir.

Bu düsturdan görünür ki, sərbəst yükdaşıyıcıların udma əmsalı udulan fotonların dalğa uzunluğunun kvadratı ilə düz mütənasibdir. Konkret səpilmə mexanizmlərinin kvant nəzəriyyəsinə əsasən təhlili sərbəst yükdaşıyıcıların udma əmsalının udulan fotonun dalğa uzunluğundan asılılığı üçün aşağıdakı asılılıqları verir:

Akustik fononlardan səpilmə üçün - $\alpha(\lambda) \sim \lambda^{3/2}$;

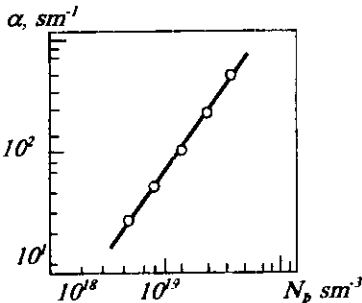
Optik fononlardan səpilmə üçün - $\alpha(\lambda) \sim \lambda^{3/2}$;

İonlaşmış aşqarlardan səpilmə üçün - $\alpha(\lambda) \sim \lambda^3$ və yaxud $\alpha(\lambda) \sim \lambda^{7/2}$.

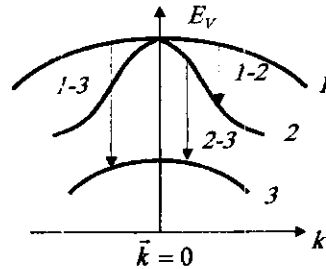
Ümumi halda bütün səpilmə mexanizmləri mövcuddur və udma əmsalı aşağıdakı cəmlə ifadə olunur:

$$\alpha(\lambda) = \sum \alpha_i(\lambda) = c_1 \lambda^{3/2} + c_2 \lambda^{3/2} + c_3 \lambda^{7/2}.$$

Aşqarların konsentrasiyasından, temperaturdan və üstünlük təşkil edən qəfəs rəqslərinin tipindən asılı olaraq bu və ya digər səpilmə mexanizmi üstün olacaqdır. Əgər aşqar ionlarından səpilmə üstünlük təşkil edərsə udma əmsalının aşqar ionlarının konsentrasiyasından asılılığı $\alpha(\lambda) \sim N, \lambda^{7/2}$ şəklində olar.



Şəkil 7.16. 4,2K-də və $\lambda = 2,4mkm$ -də germaniumda sərbəst yükdaşıyıcılarla udulma



Şəkil 7.17. Sərbəst deşiklərin selektiv udması zamanı optik keçidlər: 1-ağır deşiklərin alt zonası; 2- yüngül deşiklərin alt zonası; 3 - orta deşiklərin alt zonası

Lakin yüksək dərəcədə aşqarlanmış yarımkəçiricidə udma əmsalının aşqar ionlarının konsentrasiyasından asılılığı xətti qalmır, çünki

udma əmsalı həm də relaksasiya müddətindən asılıdır, relaksasiya müddəti isə öz növbəsində aşqar ionlarının konsentrasiyasından asılı olur.

7.16-cı şəkildə ikiqat loqarifmik miqyasda yüksək dərəcədə aşqarlanmış germaniumda sərbəst yükdaşıyıcıların udma əmsalının aşqar ionlarının konsentrasiyasından asılılığı verilmişdir. Bu asılılığın meyl bucağı 3/2-ə bərabərdir ki, o da $\alpha \sim N_i^{3/2}$ qanununa uyğundur. Onda (7.7.1) düsturundan tapırıq ki, $\tau \sim N_i^{-1/2}$.

Bu növ asılılıqlar yarımkəçiricilərdə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını optik üsulla tapmaq üçün dərəcələnmə əyriləri kimi istifadə oluna bilərlər.

Biz artıq göstərmişdik ki, sərbəst yükdaşıyıcıların udma spektrində xüsusiyyətləri: meydana çıxması zona quruluşunun xüsusiyyətlərinə uyğundur: valent zonasının mürekkəb quruluşu sərbəst dəşiklərin selektiv udmasına, keçirici zonanın mürekkəb quruluşu isə sərbəst elektronların selektiv udmasına səbəb olur. Əvvəlcə p -tip materiallarda selektiv udulma üzərində dayanıq. 7.17-ci şəkildə $\vec{k} = 0$ nöqtəsi ətrafında valent alt zonalarının quruluşu göstərilmişdir. Bildiyimiz kimi belə quruluş həm germaniumda həm də silisiumda müşahidə olunur. Həmin şəkildə dəşiklərin alt zonalar arasında optik keçidləri göstərilmişdir. Yada salaq ki, oxların yuxarıdan aşağıya istiqaməti dəşiklərin enerjisinin artmasına uyğun gəlir. Fərz edək ki, \vec{k}_0 nöqtəsi ətrafında zonalar sferikdir. (7.3.1) düsturuna uyğun olaraq valent zonasının alt zonaları arasında keçidlər üçün udma əmsallarını yazaq: α_{13} - ağır dəşiklərin altzonasından orta dəşiklərin altzonasına keçidlər üçün, və α_{23} - yüngül dəşiklərin orta dəşiklərin altzonasına keçidlər üçün:

$$\alpha_{13}(\hbar\omega) \sim f_{13}g_{r(13)}(\hbar\omega); \quad \alpha_{23}(\hbar\omega) \sim f_{23}g_{r(23)}(\hbar\omega).$$

1 - 3 keçidlərinin enerjisini yazaq:

$$E_{13} = \left(E_v + \Delta E_{s_v} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{par}^*} \right) - \left(E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{pa}^*} \right) = \Delta E_{s_v} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_{par}^*} - \frac{1}{m_{pa}^*} \right) \quad (7.7.2)$$

$m_{par}^* < m_{pa}^*$ olduğundan M_0 tipli Van-Hov xüsusiyyəti alır və $g_{r(13)}(\hbar\omega)$ - funksiyası aşağıdakı asılılığı ödəməlidir:

$$g_{r(13)}(\hbar\omega) \sim \sqrt{\hbar\omega - \Delta E} \quad (7.7.3)$$

$\vec{k} = 0$ nöqtəsində 1-3 keçidləri qadağan olunmuş keçidlərdir, onda f_{13} osilyator qüvvəsi üçün alırıq:

$$f_{13} \sim (\hbar\omega - \Delta E_{s_v}) \quad (7.7.4)$$

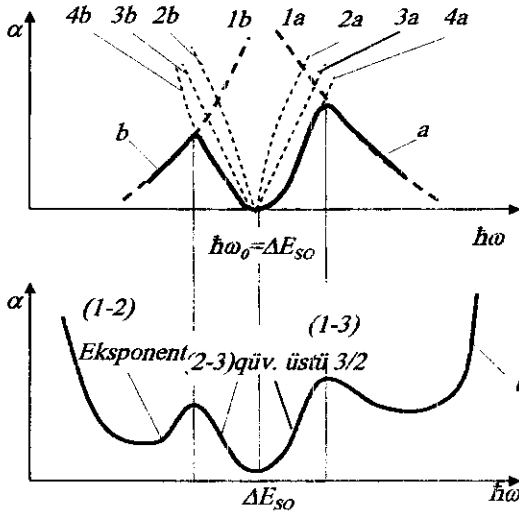
Udulma əmsalının sonuncu ifadəsində ağır dəşiklərin alt zonalarının dolma dərəcəsini nəzərə almaq lazımdır. Fərz edək ki,

deşikler sistemi cırlaşmamışdır və enerjilərin Maksvel-Bolsman paylanmasından istifadə etmək olar:

$$f_p(E, T) \sim e^{-p^2 / (2m_{pa}^* k_0 T)} \quad (7.7.5)$$

1-3 keçidlərində (7.7.2) ifadəsindən alınan $\hbar\omega = E_{13} = \Delta E_{S_0} + [p^2 (m_{pa}^* - m_{por}^*)] / (2m_{pa}^* m_{por}^*)$ enerjinin saxlanması qanununun ödənilməsi dəşiklər iştirak etdiyindən impulsun qiymətləri aşağıdakı şərti ödəməlidir:

$$p^2 = [2(\hbar\omega - \Delta E_{S_0}) m_{por}^* m_{pa}^*] / (m_{pa}^* - m_{por}^*) \quad (7.7.6)$$



Şəkil 7.18. Alt zonalar arasında keçidlər üçün udma xəttinin forması: a- ağır və orta dəşiklər üçün. Punktirlə aşağıdakı asılılıqlar göstərilmişdir:

$$1a - \exp[(-\hbar\omega - \Delta E_{S_0}) / k_0 T]; \quad 2a - g_r(13) \sim (\hbar\omega - \Delta E_{S_0})^{1/2};$$

$$3a - f_{13} \sim (\hbar\omega - \Delta E_{S_0}); \quad 4a - \sim (\hbar\omega - \Delta E_{S_0})^{3/2};$$

$$b - \text{yüngül və orta dəşiklər: } 1b - \exp[(4E_{S_0} - \hbar\omega) / k_0 T];$$

$$2b - g_r(23) \sim (\Delta E_{S_0} - \hbar\omega)^{1/2}; \quad 3b - f_{23} \sim (\Delta E_{S_0} - \hbar\omega);$$

$$4b - \sim (\hbar\omega - \Delta E_{S_0})^{3/2}; \quad c - p - \text{tip yarımkəçiricilərdə selektiv udulma}$$

(7.7.6) ifadəsini (7.7.5) düsturunda yazmaqla birinci altzonada dəşiklərin enerjiyə görə paylanma funksiyası üçün alırıq:

$$f_p(E, T) \sim e^{-\frac{\hbar\omega - \Delta E_{S_0}}{k_0 T} \frac{m_{por}^*}{m_{pa}^* - m_{por}^*}} \quad (7.7.7)$$

$$\alpha_{13} \sim f_{13} g_r(13)(\hbar\omega) f_p(E, T) \quad (7.7.8)$$

olduğunu hesab edib (7.7.8) düsturunda (7.7.3) (7.7.4) və (7.7.7) ifadələrini yerinə yazmaqla alarıq:

$$\alpha(\hbar\omega) \sim (\hbar\omega - \Delta E_{s_2})^{3/2} \exp\left\{\frac{\hbar\omega_0 - \Delta E_{s_2}}{k_0 T} \cdot \frac{m_{por}^*}{m_{pr}^* - m_{por}^*}\right\} \quad (7.7.9)$$

7.18-ci şəkildə (7.7.8) düsturuna uyğun olaraq 1-3 keçidləri üçün udulma əyrisinin forması göstərilmişdir.

2 – 3 keçidləri üçün də analogi çıxarılış aparmaq olar:

$$E_{23} = \left(E_V + \Delta E_{s_2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{por}^*}\right) - \left(E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{pr}^*}\right) = \Delta E_{s_2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_{por}^*} + \frac{1}{m_{pr}^*}\right) \quad (7.7.10)$$

$m_{por}^* > m_{pr}^*$ olduğundan Van-Hov xüsusiyyəti xüsusi M , tipli olacaqdır. 2-3 keçid tipinin qadağan olduğunu və yüngül dəşiklərin alt zonasının dəşiklərlə dolmasının ağır dəşiklərin alt zonasının dəşiklərlə dolmasına oxşar qaydada hesablamaq mümkün olduğunu nəzərə alaraq 2-3 keçidlərinin udma xətlərinin forması üçün alarıq:

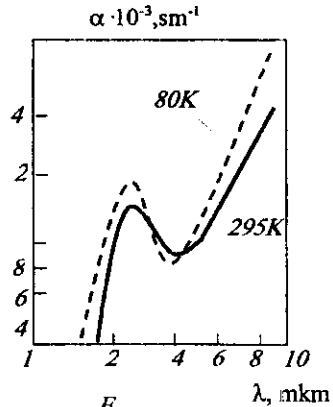
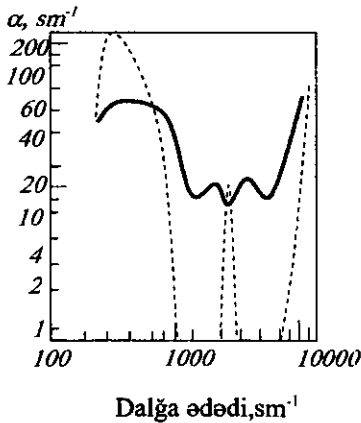
$$\alpha_{23}(\hbar\omega) \sim f_{23} g_{r(23)} f_p(E_2, T) \quad (7.7.11)$$

Bunu şəkil 7.13,b-də göstərilən qrafik şəklində təsvir etmək olar.

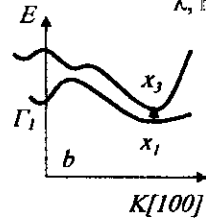
7.18 a,b şəklində göstərilən asılılıqları cəmləyərək p -tip materialda şəkil 7.18 c-də göstəriləni kimi sərbəst dəşiklərin selektiv udma spektrini alarıq. 1-2 keçidləri $\hbar\omega_0$ astana enerjisində malik deyildir ($\hbar\omega_0$), çünki E_V nöqtəsində yüngül və ağır dəşiklərin $E(\vec{k})$ budaqları təmasda olur. Van-Hov xüsusiyyəti 1-3 keçidlərində olduğu kimi M_0 tiplidir. 1-2 keçidləri spektrin daha uzundalğalı hissəsində baş verir və yüngül və ağır dəşiklərin qeyri-selektiv udması ilə üst-üstə düşür.

7.18, c şəklinin təhlilindən ΔE_{s_2} orbital parçalanma enerjisini tapmaq olar. Temperatur azaldıqca 1-3 və 2-3 piklərinin eksponensial kənarları daha dik, piklərin özləri isə daha iti olmalıdır. Spektrin udulmanın üstlü qanunla baş verdiyi hissəsi temperaturun dəyişməsi ilə praktiki olaraq dəyişmir. Onda temperaturun azalması ilə selektiv udma spektri öz şəklini dəyişir (şəkil 7.19). Bunu p -Ge-da iki müxtəlif temperaturda çıxarılmış sərbəst dəşiklərin udma spektrində aydın görmək olar. Qeyd edək ki, selektiv udulmanın intensivlikləri və piklərin maksimumları da nümunənin akseptorlarla aşqarlanma dərəcəsindən asılıdır. Fermi səviyyəsi valent zonasının dərinliklərinə yerini dəyişdikdə 1-3 piki böyük enerjilər tərəfə, 2-3 piki kiçik enerjilər tərəfə, 1-2 zolağının aşağı enerjili sərhəddi isə böyük enerjilər tərəfə sürüşür. Əgər yarımkeçiricinin qadağan zonasının eni spin-orbital parçalanma enerjisindən kiçik və ya ora yaxındırsa dəşiklərin selektiv udmasını məxsusi udulma fonunda ayırd etmək çətindir.

n-tip yarımkəçiricilərdə keçirici zonadakı alt zonalar arasında baş verən keçidlərlə əlaqədar olan sərbəst elektronların selektiv udulması da mümkündür. Sərbəst elektronlar tərəfindən belə udulma *n*-tip *GaP*-də müşahidə olunmuşdur. Bu udulmanın spektri şəkil 7.20-də göstərilmişdir. Uzundalğalı hissədə sürətlə artan udulma altzonalar arasında qeyri-selektiv udulmaya uyğundur. 0,27 eV kiçikenerjili astana üçün udulmanın piki [100] nöqtəsində keçirici zonanın alt zonalarının x_1 və x_3 arasındakı keçidə uyğundur.



Şəkil 7.19. 300K (bütöv xətt) və 77K (punktir xətt) temperaturalarda p-tip germaniumda selektiv udulma.



Şəkil 7.20. *a* - *n* - *GaP*-da sərbəst elektronlarla selektiv udulma spektri;
b - *GaP*-nin sərbəst elektronlarla udulmanın pikinə uyğun gələn x_1 - x_3 tip keçidlərini izah edən zona diaqramının bir hissəsi.

Sərbəst yükdaşıyıcıların selektiv udulmasının tədqiqi zona quruluşunun xüsusiyyətlərini aşkar etməyə, alt zonaların energetik parçalanmasını və sərbəst yükdaşıyıcıların effektiv kütlələrini hesablamağa imkan verir.

§7.8. Cırlaşmış yarımkeçiricilərin əks olma spektrində plazma rezonansı

Əgər R əksolma əmsalının (7.1.14) ifadəsində \tilde{n} sındırma əmsalının və \tilde{k} udma əmsalının tezlikdən asılılığını ((7.1.8)+(7.1.12) düsturları) nəzərə alsaq $R(\omega)$ əksolma əmsalının tezlikdən asılılığını almaq olar. Sərbəst yükdaşıyıcıların təsiri ilə $R(\omega)$ tezlik artdıqca əvvəlcə azalır, sonra isə artmağa başlayır. Beləliklə, $\omega = \omega_p$, tezliyi yaxınlığında əks olmanın minimumu müşahidə olunur ki, bu da **plazma minimumu** adlanır. ω_p plazma tezliyini aşağıdakı düsturdan tapmaq olar:

$$\omega_p = [4\pi e^2 n / (m_e^* \epsilon_0)]^{1/2} \quad (7.8.1)$$

Şəkil 7.21, a-da $\omega\tau \gg 1$ və udulma olmadığı ($\tilde{k} = 0$) hal üçün hesablanmış $R(\omega)$ asılılığı göstərilmişdir. $\omega = \omega_p$ tezliyində əksolma əyrisində kəskin sınıma alınır. Lakin kristal mühitində işığın udulmasını praktiki olaraq nəzərə almamaq olmaz. Ona görə də $\omega = \omega_p$ tezliyində çıxarılmış real əks olma spektrindəki sınıq xətt və kəskin minimum bir qədər hamarlaşır. Zəif udulma fərziyyəsində udma əmsalının nəzəri olaraq sıfıra bərabər olduğu ω_{\min} tezliyi üçün yazmaq olar ki:

$$\omega_{\min} = \omega_p [\epsilon_0 / (\epsilon_0 - 1)]^{1/2}.$$

Əks olmanın minimumunu təyin etməklə ω_p plazma tezliyini tapmaq olar. ω_p -nin məlum qiymətinə görə isə (7.8.1) düsturuna əsasən

$\frac{n}{m_e^*}$ -i, yəni, yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının optik effektiv kütləyə

nisbətini tapmaq olar. Əgər hər hansı bir başqa üsulla (məsələn, Holl əmsalını ölçməklə) yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını təyin etsək m_e^* optik effektiv kütləni də təyin etmək olar. Effektiv kütlə məlum olduqda bu üsuldən istifadə etməklə yüksək dərəcədə aşqarlanmış yarımkeçiricilərdə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını təyin etmək olar. Lakin plazma minimumunun yayılmış olması nəticəsində praktikada bu məsələnin həlli müəkkəbləşir. Udulmanın nəzərə alınması plazma əksolunması zamanı alınan təcrübi nəticələrin emalı üçün xüsusi metodika tələb edir. Sovet fizikləri A.A.Kuxarskinin və V.K.Subaşıyevin təklif etdikləri üsul ən çox yayılmış üsuldür. Bu üsul R_{\min} -un ölçülmüş qiymətinə görə m_e^* -nin qrafo-analitik təyininə əsaslanır. Bu üsul plazma əksolmasından alınan nəticələrə görə stasionar keçiriciliyi ($\sigma|_{\omega_0}$) və yükdaşıyıcıların yürüklüyünü də hesablamağa imkan verir. Effektiv kütləni və yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını bilməklə relaksasiya

müddətini hesablamaq olur. Lakin bütün bu hesablamaları aparmaq üçün ya yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını, ya da onların optik effektiv kütləsini təyin etməyə imkan verən əlavə metodikadan istifadə etmək lazımdır, çünki plazma əksolması üsulu prinsipcə yalnız $\frac{n}{m_c}$ nisbətini təyin etməyə imkan verir.

Plazma minimumu oblastında əksolmadan $\frac{n}{m_c}$ nisbətini hesablamaq üçün aşağıdakı kimi hərəkət etmək lazımdır: Udulmanı nəzərə almayıb (7.1.13) və (7.1.15) düsturlarından istifadə etməklə

$$[(1 + \sqrt{R}) / (1 - \sqrt{R})]^2 / \epsilon_0 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

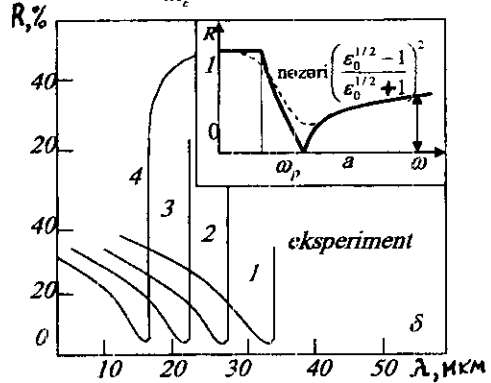
asıllığı yazmaq olar.

Plazma minimumu ətrafında $[(1 + \sqrt{R}) / (1 - \sqrt{R})]^2 / \epsilon_0$ funksiyasının ω^{-2} -dən asılılıq qrafikini qursaq bu asılılığın meyil bucağının tangensini plazma tezliyinin kvadratını (ω_p^2) verir.

Kramers-Kroniq münasibətinin köməyi ilə plazma əks olunmasından alınan nəticələrin EHM-dən istifadə etməklə hesabı yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının onların effektiv kütləsinə nisbətini daha münasib yolla və daha dəqiq təyin etməyə imkan verir. Plazma əksolmasına misal olaraq şəkil 7.21, b-də müxtəlif konsentrasiyalı yükdaşıyıcıları olan n -tip $JnSb$ nümunələrinin əksolma spektrləri verilmişdir.

§7.9. Fonon udulması və aşqar atomlarının lokal rəqsləri vasitəsilə udulma

İşığın bilavasitə qəfəs atomlarının rəqsləri tərəfindən udulması nəticəsində fotonun enerjisi fononun enerjisinə çevrilir. Əgər birfononlu udulma prosesi gedirsə, yeni bir fotonun udulması bir fononun



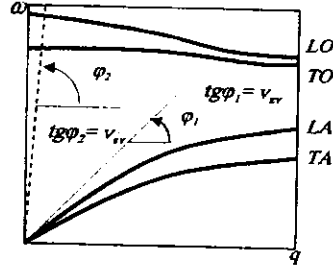
Şəkil 7.21. a - plazma minimumu ətrafında qaytarma əmsalının tezlikdən hesablanması; b - yükdaşıyıcıları müxtəlif konsentrasiyaları üçün n -tip $JnSb$ nümunələrində təcrübi qaytarma spektrləri. 1 - $3,5 \cdot 10^{17} \text{ sm}^{-3}$; 2 - $6,2 \cdot 10^{17} \text{ sm}^{-3}$; 3 - $1,2 \cdot 10^{18} \text{ sm}^{-3}$; 4 - $2,8 \cdot 10^{18} \text{ sm}^{-3}$.

yanarmasına səbəb olursa enerjinin və impulsun saxlanması qanunları aşağıdakı şəkildə olar:

$$h\omega = h\omega_q; \quad h\vec{q}_{\text{fot}} = h\vec{q},$$

burada ω və ω_q - uyğun olaraq fotonun və fononun tezlikləri, \vec{q}_{fot} və \vec{q} - fotonun və fononun dalğa vektorlarıdır.

Udulma prosesində iştirak edən fotonların maksimal enerjiləri fononların verilmiş kristal üçün maksimal mümkün olan tezlikləri ilə təyin olunur. Enerjinin saxlanması qanununa əsasən kristalda udularaq bir fonon yaranan fotonun dalğa vektorunu hesablasaq alarıq ki, $\vec{q}_{\text{fot}} \approx 10^3 - 10^4 \text{ sm}^{-1}$. Onda impulsun saxlanması qanunundan alınır ki, fotonun udulması nəticəsində qəfəsdə dalğa vektoru $\vec{q} \approx 10^3 - 10^4 \text{ sm}^{-1}$ olan



Şəkil 7.22 Bir fononlu optik udulmanı izah edən sxem

fononlar yaranar, bu isə Brilliyen zonasının mərkəzi yaxınlığındadır (yada əlaqə ki, Brilliyen zonasının ölçüləri $\sim 10^8 \text{ sm}^{-1}$ tərtibindədir). 7.22-ci şəkildə akustik və optik fononların dispersiya əyriləri göstərilmişdir. Qırıq xətlərlə fotonlar üçün dispersiya qanunu göstərilmişdir. Toxunanın $q=0$ nöqtəsində fononların dispersiya qanununun akustik budağına meyli kristalda səs sürətinin qiymətini verir. Fononların dispersiya əyrisinin meyl bucağı kristal daxilində işıq sürətinə uyğun gəlməlidir. Akustik fononların dispersiya əyrilərinin (TA və LA) fotonların dispersiya əyriləri ilə kəsişməməsi onu göstərir ki, fotonun udulması nəticəsində qəfəsdə akustik fonon yaranma bilməz. Qəfəsin foton udulması nəticəsində yalnız optik fonon yaranma bilər, həm də uzununa optik fonon (LO) deyil, yalnız eninə optik fonon (TO) yaranma bilər.

Fotonun kristalda udulması nəticəsində yaranan fononun dalğa vektorunun istiqaməti impulsun saxlanması qanununa görə udulan fotonun dalğa vektoru istiqamətində olmalıdır. Məlumdur ki, işıq dalğası eninə elektromaqnit dalğasıdır. Işıq dalğasının elektrik vektorunun təsiri ilə kristalda induksiyaalanan dəyişən dipol momenti işıqın elektrik sahəsi boyunca istiqamətlənməlidir, yəni, eninə elektromaqnit dalğası qəfəs atomlarının eninə rəqslərini (TO - fononları) yaradır. Beləliklə, birfononlu optik udulma yalnız TO - fononları yarada bilər. TO - fononlar həm də yalnız elə kristallarda yaranma bilər ki, o kristalların elementar özəyində dəyişən dipol momentinin yaranması mümkün olsun. Belə udulma təcrübi

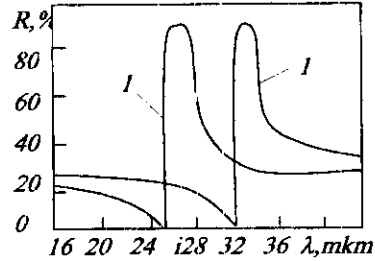
olaraq ion rabitəli $NaCl, LiF, KBr$ və s. kristallarda müşahidə olunur. Bir fononlu udulma əmsalı kifayət qədər böyük qiymətlər alır $-\alpha \approx 10^4 \text{ sm}^{-1}$, bu zaman udulma spektrində xəttin eni çox az olur. Hündür iti udma piki əksolma spektrində analoji pike uyğun gələcəkdir. Ensiz spektral oblastda güclü əks olma ilk dəfə olaraq məhz ion rabitəli dielektriklərdə müşahidə olunmuşdur və o, «qalıq şüalar hadisəsi» adını almışdır. İnfraqırmızı spektroskopiyanın ilkin mərhələsində bu hadisədən işığın monoxromatikləşdirilməsində istifadə edilirdi. Əgər ion kristalı lövhələrindən ibarət güzgülər sistemine bütöv spektrli işıq daxil etsək, çıxışda «qalıq şüalar» dalğa uzunluğu oblastına uyğun gələn monoxromatikləşdirilmiş zolaq alınar; çoxqat əks olunma nəticəsində bu zolağın eni daha da, azalır. Kifayət dərəcədə ion rabitəli yarımkeçiricilər də işığı «qalıq şüalar» tipində, başqa sözlə, birfononlu proseslər hesabına əks etdirirlər.

7.23-cü şəkildə $AlSb$ və GaP üçün «qalıq şüalar» spektrləri göstərilmişdir. Müxtəlif yarımkeçiricilər üçün «qalıq şüalar» zolağının vəziyyəti kifayət qədər geniş 20-80 mkm intervalda dəyişir. Qeyd etmək lazımdır ki, birfononlu əksolma spektrinin maksimumu eninə optik fononun enerjisinə uyğun gəlmir, o, bir qədər yüksək enerjili tərəfə sürüşmüş olur. Bu rezonans əks olmaya uyğun gələn fononun enerjisini daha dəqiq təyin etmək

üçün əks olma spektrindən hesablama yolu ilə udma spektrinə keçmək lazımdır. Udma xəttində əksolma xəttindəkine nisbətən daha iti maksimum olacaqdır və əksolmanın maksimumu praktiki olaraq TO - fononun enerjisinə uyğun olacaqdır.

Kovalent rabitəli yarımkeçiricilərdə də işığın qəfəs rəqsləri tərəfindən udulması müşahidə olunur, lakin belə udulma çoxfononlu udulmadır. Foton bir fonon tərəfindən deyil, verilmiş kristal üçün tamamilə müəyyən olan fononlar kombinasiyası tərəfindən udulur. Bu kombinasiyalarda həm optik, həm də akustik fononlar iştirak edə bilərlər. Çox fononlu prosesdə əmələ gələn fononların dalğa vektorlarının qiymətinin kiçik olması tələbi vacib deyildir.

Bunu fotonun iki fononlu udulması misalında göstərək. İki fononlu udulma üçün enerjinin və impulsun saxlanması qanununu belə yazma bilərik:



Şəkil 7.23. $AlSb(1)$ və $GaP(2)$ üçün «qalıq şüalar» oblastında qaytarma

$$h\omega = h\omega_1 \pm h\omega_2; \quad h\vec{q}_{\text{tot}} = h\vec{q}_1 \pm h\vec{q}_2. \quad (7.9.1)$$

Burada müsbət işarəsi iki fononun yaranmasına uyğundur, mənfi işarəsi isə dalğa vektoru \vec{q}_{tot} olan fotonun udulması zamanı dalğa vektoru \vec{q}_1 və dalğa vektoru \vec{q}_2 olan fononun yaranmasına uyğundur.

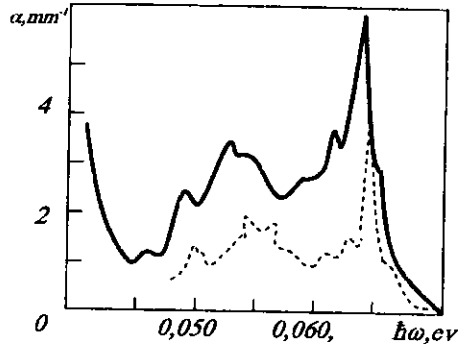
Udulmada iki fonon iştirak etdikdə impulsun saxlanması qanununda iştirak edən fononların qiymətləri deyil yalnız onların cəmi (iki fonon yaranan hal üçün) və yaxud fərqi (bir fononun yaranması, digər fononun isə udulması halı üçün) fikse olunur. Fononların sıxlığı onların tezliyi və dalğa vektoru artdıqca artdığından, əsasən Brillüen zonasının sərhəddi yaxınlığındakı böyük dalğa vektoru olan fononlar udulur.

Onda $|\vec{q}_{\text{tot}}| \ll |\vec{q}_1|, |\vec{q}_2|$ olduğundan impulsun saxlanması qanunu

$h\vec{q}_1 \pm h\vec{q}_2 \approx 0$ şəklinə düşür. Beləliklə iki fonon yarandıqda $\vec{q}_1 \approx -\vec{q}_2$ olur, lakin bir fonon udulduqda və digər fonon yarandıqda $\vec{q}_1 \approx \vec{q}_2$ olur.

Çoxfononlu udulmada bu qaydaların və bəzi digər seçmə qaydaların tələb etdiyi fonon kombinasiyaları çoxdur, bu isə udulma spektrinin müəkkəb olmasına səbəb olur. Bundan başqa belə çoxtezlikli proseslər üçün udma əmsalının qiyməti böyük deyildir (α bir neçə vahid tərtibindədir), yəni kiçik intensivlikli və çox yaxın yerləşmiş ayrı-ayrı xətlər çətin ayırılmalıdır. Çoxfononlu udulmanın spektri IQ oblastda geniş zolaq təşkil edir. Bu zolağın fonunda ən ehtimalı fonon kombinasiyalarının rezonans piklərini müşahidə etmək mümkündür. *GaAs* üçün belə bir spektr 7.24-cü şəkildə verilmişdir.

Fonon udulması spektrini oxumaqla çoxfononlu udulmada iştirak edən fonon kombinasiyaları tapılmışdır. Məsələn, silisium üçün $3TO, 2TO + LO, TO - LO, TO + LA, TO + TA, TO - TA$ fonon kombinasiyaları daha aydın xətlər verir. Qomeopolyar kovalent kristallarda qəfəsin hər bir tip rəqsləri ayrılıqda dəyişən dipol momentləri yaratmışdır, ona görə də işığın elektromaqnit rəqsləri ilə qarşılıqlı təsirdə ola bilmir. Lakin, əgər iki tip rəqslər mövcuddursa, onlardan biri atomların elektron örtüklərini deformasiya etdirərək onun yüklənməsinə səbəb olur, digəri isə bu yüklərin rəqslərini yaradır, yeni dəyişən dipol momenti yaradır. Fonon



Şəkil 7.24. 0,04–0,07 eV enerjilər oblastında *GaAs*-də fonon udulması spektri

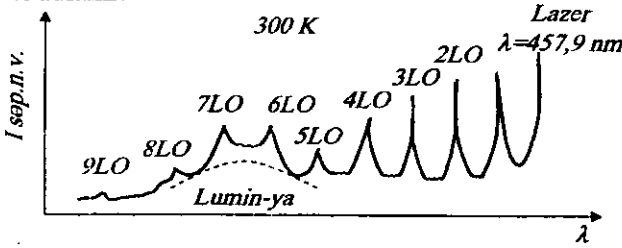
cütünün yaratdığı dəyişən dipol momentinin rəqs tezliyi enerjinin (7.9.1) saxlanması qanununa uyğun olaraq onu yaradan fononların ya tezlikləri cəminə, ya da tezlikləri fərqiyyə bərabər olur.

Elektron örtüklərinin deformasiyası nöqtəyi-nəzərinə hansı tip rəqsin daha effektiv olduğunu araşdırmaq. Uzun dalğalı rəqslər zamanı qonşu atomlar demək olar ki, eyni faza ilə rəqs edirlər və elektron örtükləri praktiki olaraq deformasiyaya uğramırlar. Qısa dalğalı rəqslər zamanı isə qonşu atomların rəqs fazaları çox fərqli olur və elektron örtükləri nəzərə çarpacaq dərəcədə deformasiyaya uğrayırlar. Beləliklə, məhz qısa dalğalı fononlar dəyişən dipol yaratmaq baxımından daha effektivdirlər. Ona görə də fonon udulmasının maksimumu spektrin fononlar üçün Brilliyen zonasının sərhəddinə uyğun oblastına düşür.

Fononlar kristal qəfəsi atomlarının rəqslərini təsvir edir və kristalda lokallaşmış deyil bütün kristala aid olur. Əgər kristalda aşqar atomları olarsa, onlar da istilik rəqslərində iştirak edəcəklər, lakin bu rəqslərin tezlikləri və xarakteri qəfəs atomlarının tezliklərindən və xarakterindən fərqlənəcəkdir. Bundan başqa aşqar atomlarının rəqsləri lokallaşmış olacaqdır. Aşqarlı kristalların qəfəs udulmasının spektrində aşqar atomların istilik hərəkəti ilə əlaqədar olan lokal rəqslərin nazik xətləri müşahidə olunur. Bu rəqslərin tezliyi çox vaxt aşqarın tipini xarakterizə edir. Beləliklə fonon spektroskopiyasından kristalın aşqar tərkibini öyrənmək üçün istifadə etmək olar. Qəfəs udulmasının aşqar spektrini tədqiq etmək üçün əvvəlcə bu kristalda məxsusi fonon udulmasını yaxşı öyrənmək lazımdır. Bu metodiyadan istifadə olunmasının parlaq nümunəsi – silisiumda və germaniumda oksigen aşqarlarının aşkarlanmasıdır. Oksigen – elektrik cəhətdən fəal aşqar deyil və ona görə də onu Holl effektinə əsasən təyin etmək olmaz. Silisium kristalında oksigen komplekslər əmələ gətirir, bu komplekslərdən biri SiO molekuludur. $Si-O$ rabitəsi 9 mkm (0,14 eV) oblastında xarakterik rəqsi spektrə malikdir. Bu oblastda baş verən udulma silisiumun tərkibində oksigen atomları olduğunu təsdiq edir. Lokal rəqslərin spektrlərinə görə silisium və germaniumda olan oksigenin miqdarını təyin etməyə imkan verən xüsusi metodikalar işlənmişdir.

İşığın qəfəsin istilik rəqsləri ilə qarşılıqlı təsirinin vacib mexanizmlərindən biri olan işığın fononlardan səpilməsini də qeyd etmək lazımdır. Kristal daxilində hərəkət edən foton qəfəs rəqsləri ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində öz enerjisini və impulsunu dəyişə bilər. Bu zaman foton tamamilə udulmur, o yalnız öz enerjisinin və impulsunun bir hissəsini qəfəsə verir. Beləliklə kristalı monoxromatik işıqla işıqlandıraraq çıxışda tezliyi dəyişmiş və müxtəlif dalğa vektoruna malik olan səpilmiş fotonlar müşahidə etmək olar. Fotonların optik fononlardan səpilməsi **Raman-**

Mandelştamm səpilməsi, akustik fononlardan səpilməsi isə Brillyüen səpilməsi adlanır.



Şəkil 7.25. Arqon lazeri şüalarının səpilməsi zamanı CdS-in qaytarma spektri. Şüalanmanın bir hissəsi elektron-deşik cütü yaradır və lüminessensiyaya səbəb olur.

Koherent işıq çox böyük intensivliklərində (məsələn, işıq mənbəyi lazer olduqda) məcburi Raman şüalanması əldə etmək olar. Bu zaman səpilən işıq da koherent olacaq və yarımkəçirici parametrik gücləndirici kimi işləyir. 7.25-ci şəkildə arqon lazeri ilə işıqlandırılan CdS üçün əks olunmuş işıqda Raman səpilmə spektri verilmişdir.

İşıq qəfəsin istilik rəqsləri ilə qarşılıqlı təsirinin tədqiqi kristalda fononların spektri haqqında qiymətli məlumat verə bilər. Bundan başqa bu hadisə yarımkəçiricinin aşqar tərkibinin təhlilində və səpilmə effektinin köməyi ilə işıq enerjisinin başqa növ enerjiyə çevrilməsində artıq öz texniki tətbiqini tapmaqdadır.

§7.10. Yarımkəçiricilərin optik xassələrinin tədqiqinin diferensial üsulları

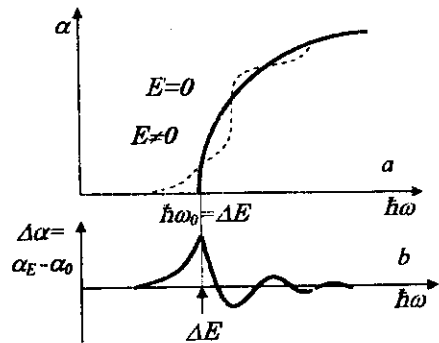
Artıq göstərilirdiyi kimi bərk cisimlərdə optik əksolma və udma spektrlərinin xüsusiyyətlərinin tədqiqi kristalların xassələri haqqında çox qiymətli məlumatlar verir. Əgər optik udulma müxtəlif elektron keçidləri (fononsuz və ya fononların müşayiəti ilə) ilə əlaqədardırsa, udma və əksolma spektrlərinin təhlili kristalların zona quruluşunun parametrlərini təyin etməyə imkan verir. Əgər kristala onun zona quruluşunun parametrlərini dəyişən xarici amil təsir göstərsə, əksolma və udma spektrində də biz dəyişiklik müşahidə etməliyik. Belə dəyişikliyə misal olaraq artıq tanış olduğumuz udma sərhəddinin temperaturadan asılı olaraq sürüşməsinə göstərmək olar.

Zona quruluşunun parametrlərinin dəyişməsinə səbəb olan təsirlərdən elektrik sahəsini, bircəli və hərtərəfli sıxılmanı, maqnit sahəsini, fətohəyəcanlanmanı və s. göstərmək olar.

Müəyyən olunmuşdur ki, bu xarici təsirlər və ya onların kombinasiyası Brillyüen zonasında olan Van-Hov xüsusi nöqtələrində daha güclüdür. Xüsusi nöqtələrdən uzaqlarda isə bu təsir çox zəifdir. Əgər xarici təsir hər hansı ν tezliyi ilə modullaşmış olarsa və qeydedici qurğuda həmin ν tezliyində nazik zolaqlı gücləndirmə və siqnalın sinxron defektə edilməsi nəzərdə tutulubsa, qeyd edilən spektrdə siqnal yalnız Van-Hovun xüsusi nöqtələri yaxınlığında müşahidə ediləcəkdir. Digər spektral oblastlarda isə siqnal gücləndirilməyəcək və qeyd edilməyəcəkdir. Optik spektrlərin müşahidəsinin belə seçkili üsulu **diferensial üsul** və yaxud **modulyasyon spektroskopiyaya üsulu** adlanır. Modulyasiyalı spektroskopiyaya siqnal-küy nisbətini xeyli yaxşılaşdırmağa imkan verir. Məsələn, diferensial əksolmada nisbi əks olmanın $\Delta R/R(0) = [R(\omega) - R(0)]/R(0)$ qiyməti ölçülür. Burada $R(\omega)$ və $R(0)$ -xarici amilin təsir etdiyi və kəsildiyi hallar üçün əksolma əmsallarıdır.

Müasir eksperiment texnikası $\Delta R/R(0) \approx 10^{-6}$ dəqiqliklə ölçü aparmağa imkan verir. Bu, adi statistik üsulların dəqiqliyindən çox yüksəkdir (ən yaxşı eksperimental şəraitdə statistik üsulun dəqiqliyi 1-0,1%-dir). Bu, diferensial spektroskopiyaya böyük maraq doğurmuşdur. Gözləmək olar ki, optik tədqiqatlarda müasir eksperimental texnika məhz bu istiqamətdə inkişaf edəcəkdir. Spektroskopiyada istifadə edilən əsas diferensial üsullara qısaca nəzər salaq.

Elektro-əksolma. Dəyişən elektrik sahəsində əks olmanın tədqiqi üsulu kristala kifayət qədər qüvvətli elektrik sahəsi təsir etdikdə qadağan zonadakı enerji aralıqlarının dəyişməsi hadisəsinə, başqa sözlə Frans-Keldis effektinə əsaslanır. Kristal qüvvətli elektrik sahəsində yerləşdirildikdə elektronun hal sıxlığı funksiyası üçün qadağan zonaya giren eksponensial «quyruq» və icazəli zonada zonaların ekstremumları yaxınlığında ossilyasiyalar əmələ gəlir. Bunun nəticəsində elektrik sahəsində udma sərhəddinin forması 7.26-cı şəkildə qırıq xətlərlə göstərilirdiyi kimi dəyişəcəkdir. $\Delta\alpha = \alpha_E - \alpha_0$ fərq udulmasının spektri udma astanasına uyğun enerjiddə, yəni $\hbar\omega_0 = \Delta E$



Şəkil 7.26. Düz keçidlər üçün elektrik sahəsinin zonalararası udulmaya təsiri:

a) elektrik sahəsi olmadıqda (bütöv xətt) və elektrik sahəsində (punktir xətt) udulma spektri, b) diferensial udulma spektri.

nöqtəsində xarakterik xüsusiyyətə malik olur. Van-Hovun müxtəlif xüsusi M , nöqtələri üçün dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissələrinin spektrlərində xətlərin ətraflı nəzəri təhlili Aspneç tərəfindən aparılmışdır. Məlum olmuşdur ki, Van-Hovun müxtəlif xüsusi nöqtələri üçün spektrlər müxtəlif şəkildə olur. Ona görə də differensial üsul nəinki zonalar arası keçidlərə uyğun enerjilər fərqini yüksək dəqiqliklə təyin etməyə, həm də zona quruluşunu qurmaq üçün çox vacib olan böhran nöqtələrin tipini təyin etməyə imkan verir. Elektro-əks olma metodikası müasir eksperimental texnikada təkcə zonalarası keçidləri öyrənmək üçün deyil, həm də aşqar səviyyələrin enerji parametrlərini tədqiq etmək üçün geniş istifadə olunur. Bu halda elektro-əks olma spektrlərini deyil elektro-udulma spektrləri tədqiq edilir.

Termo-əks olma - bu tədqiqat üsulu kristalın modullaşmış qızdırılmasına əsaslanır. Kristal tutqacına bərkidilmiş xüsusi qızdırıcı alçaq tezlikli dəyişən gərginlik mənbəyi vasitəsilə qızdırılır. Alçaq tezliklə modulyasiya edilmiş lazer şüalanmasının udulması nəticəsində baş verən istilik təsiri çox effektivdir. İstilik təsirlərinin etəətli olması səbəbindən alçaq tezlikli modulyasiya tələbi və zona quruluşu parametrlərinin modulyasiya dərinliyinin kiçik olması termo-əksolma üsulunun nöqsanıdır. Lakin termo-əks olma spektrini açmağa imkan verən nəzəriyyə çox da mürəkkəb olmayıb detallarına kimi yaxşı işlənmişdir.

Foto-əksolma - bu tədqiqat üsulu böyük intensivlikli modullaşmış işıqla işıqlandırmağa əsaslanmışdır. Mahiyyətə bu üsul da böyük intensivlikli işıq dalğalarının elektrik sahəsində elektro-əks olmasıdır. Əks-olmanın optik modulyasiyası yarımkəçiricinin zonaların əyildiyi səthi yaxınlığında intensiv işıq generasiyası vasitəsilə icra oluna bilər. Optik inyeksiya zonaları düzləndirərək səth potensialını kiçildir. Foto-əksolma üsulunun həssaslığı elektro-əksolmanın həssaslığından azdır (elektro-əksolma üçün minimal qiymət $\Delta R/R(0) \approx 10^{-4}$). Bu üsulun üstünlüyü ondadır ki, elektrodlardan istifadə etmək lazım gəlmir. Adətən modulyasiya məqsədilə lazer şüalanmasından istifadə olunur.

Pyezo-əksolma - bu üsulda optik tədqiqatlarda nümunənin səthinə nəzərən müxtəlif istiqamətlərdə və müxtəlif kristalloqrafik ox boyunca modulyasiya edilmiş təzyiqdən istifadə olunur. Hər tərəfli sıxılma zamanı (hidrostatik təzyiq) pyezo-əksolma spektrinin təhlili termo-əksolma ilə ümumi olan nəzəri izahdan istifadə etməyə imkan verir. Biroxlu sıxılmanın tətbiqi daha mürəkkəb nəzəri izahat tələb edir, lakin o, zona quruluşunun müxtəlif nöqtələrində hal simmetriyası xassələri haqqında daha çox məlumat verir.

Katod-əksolması - foto-əksolmadakı üsula analogi olaraq bu üsul əlavə elektron-deşik generasiyasını modullaşdırmaq məqsədilə

nümunənin sürətli elektronlarla bombardman edilməsinə əsaslanır. Lakin elektron dəstəsilə cütlərin generasiyası nümunənin lokal qızmasına səbəb olur ki, bu da alınan məlumatı təhrif edir. Qadağan zonasının eni böyük olan yarımkeçiricilərin tədqiqində bu üsul foto-əksolma üsulundan üstündür, çünki bu zaman optik generasiya çətinləşir.

Maqnit – əksolması - bu üsulda dəyişən maqnit sahəsindən istifadə olunur. Bu üsul optik oblastda şəffaf olan ferro-, ferri- və antiferromaqnetiklərin öyrənilməsində xüsusilə məqsədəuyğundur. Məsələn, Kerr effekti – ferromaqnit metal güzgü maqnitləndiriləndən sonra ondan işığın əks olunması zamanı xarakterik xüsusiyyətlərin meydana çıxması çoxdan məlum olan hadisədir. Maqnit-əksolma üsulu çox perspektivli yeni tədqiqat üsuludur. Lakin maqnit-əksolması zamanı müşahidə edilən hadisələrin mürəkkəb və çoxcəhətli olması spektrin nəzəri izahını çətinləşdirir, çünki bu hadisənin nəzəriyyəsi hələ kifayət dərəcədə inkişaf etməmişdir.

Dalğa uzunluğunun modulyasiyası – bu üsul monoxromatorun çıxış yarığına nəzərən dalğa uzunluğunun skanirə olunmasından istifadə etməyə əsaslanır. Bu üsul əksolma (və ya udma) spektrin dalğa uzunluğuna görə törəməsini müşahidə etməyə imkan verir ki, bu da spektrin yaxın yerləşmiş struktur xüsusiyyətlərini ayırd etmək üçün çox əlverişlidir.

§7.11. Yarımkeçiricilərdə rekombinasiya şüalanması

Yarımkeçiricilərdə tarazlıqda olmayan yükdaşıyıcıların rekombinasiya mexanizmlərini təhlil edərkən biz yarımkeçiricilərdə şüalanma rekombinasiyasının və elektronların şüalanma keçidlərinin mümkün olan mexanizmlərini təsvir etmişdik. Müfəssəl tarazlıq prinsipindən istifadə edərək Şokli və Van-Rusberq şüalanma rekombinasiyası spektrlərinin nəzəriyyəsini verdilər. Şüalanma rekombinasiya prosesləri optik generasiya proseslərinin və optik udulma proseslərinin əksi olan proseslərdir. Ona görə də bərk cismin udulma spektrlərində müşahidə olunan xüsusiyyətlər onun rekombinasiya şüalanmasında da müşahidə olunmalıdır. Müfəssəl tarazlıq prinsipinə görə termodinamik tarazlıqda olan sistemdə vahid zamanda vahid həcmdə baş verən şüalanma keçidlərinin sayı istilik şüalanması təsiri ilə vahid zamanda vahid həcmdə generasiya olunmuş elektron-deşik cütlərinin sayına bərabər olmalıdır. Onda:

$$R(\nu)d\nu = G(\nu)d\nu \quad (7.11.1)$$

Burada $R(\nu)$ - ν tezliyində şüalanma rekombinasiyasının sürəti,

$G(\nu)$ - ν tezlikli şüalanma təsiri ilə işıq generasiyasının sürətidir.

Vahid zamanda kvantın $W(\nu)$ udulma ehtimalını və tarazlıq şüalanmasının (mütləq qara cismin şüalanmasının) spektrində ν tezlikli fotonun $Q(\nu)$ spektral sıxlığını bilərək $G(\nu)$ generasiya sürətini hesablama olar. Onda:

$$G(\nu) = W(\nu)Q(\nu).$$

$\alpha(\nu)$ udulma əmsalını və kristalda işığın $\frac{c}{\tilde{n}}$ sürətini (\tilde{n} -ışığın arıstal mühitdə sındırma əmsalıdır) bilərək $W(\nu)$ kəmiyyətini tapmaq olar:

$$W(\nu) = \alpha(\nu) \cdot \frac{c}{\tilde{n}} \quad (7.11.2)$$

Şüalanma nəzəriyyəsində mütləq qara cismin spektrində fotonların spektral sıxlığı aşağıdakı şəkildə verilir:

$$Q(\nu) = \rho(\nu)/(h\nu) = 8\pi\nu^2\tilde{n}^3/[c^3(e^{h\nu/k_0T} - 1)] \quad (7.11.3)$$

Otaq temperaturunda zonalar arası keçidlər üçün $h\nu \gg k_0T$ şərti ödənildiyindən (7.11.3) ifadəsində məxrəcdə olan vahidi nəzərə almamaq olar. Onda (7.11.1)-(7.11.3) ifadələrindən istifadə edərək rekombinasiyanın tam sürəti üçün aşağıdakı ifadəni yazmaq olar:

$$\begin{aligned} R \int_0^\infty R(\nu) d\nu &= [8\pi k_0^3 T^3 / (c^2 h^3)] \int_0^\infty \tilde{n}^3 u^2 \alpha(u) du / (e^u - 1) \approx \\ &\approx [8\pi k_0^3 T^3 / (c^2 h^3)] \int_0^\infty \tilde{n}^3 u^2 \alpha(u) e^{-u} du. \end{aligned} \quad (7.11.4)$$

Burada dəyişənlərin $U = \frac{h\nu}{k_0T}$ əvəzləməsi aparılmışdır.

(7.11.4) düsturu kristalın şüalanma spektri ilə udma spektri arasında fundamental əlaqə yaradır. Udma spektrindəki xüsusiyyətlər rekombinasiya şüalanmasındakı xüsusiyyətlərə səbəb olur. Məsələn, verilmiş yarımkəçirici üçün əgər udma əmsalı böyükdürsə, onda bu spektral oblastda intensiv şüalanma rekombinasiyası baş verəcəkdir. Bu isə düz zonalı yarımkəçiricilərdə zonalar arası şüalanma rekombinasiyasının intensivliyinin nə üçün qeyri-düz zonalı yarımkəçiricilərdəkindən xeyli böyük olduğunu izah edə bilər. Qeyri-düz zonalı yarımkəçiricilərdə məxsusi udulma sərhəddi oblastında udma əmsalı $\alpha \approx 10^2 \text{ sm}^{-1}$ tərtibində, düz keçidlər üçün isə $\alpha \approx 10^4 + 10^5 \text{ sm}^{-1}$ tərtibindədir. Ona görə də rekombinasiya şüalanması üçün düz zonalı yarımkəçiricilərdən istifadə etmək daha məqsəddəyğündür. Lakin termodinamik tarazlıq halı üçün bizim tapdığımız şüalanma rekombinasiyasının sürəti hələ tarazsız şəraitdə şüalanma rekombinasiyasının intensivliyini xarakterizə etmir.

Stasionar halda şüalanma rekombinasiyasının R_c stasionar sürəti ilə onun R_0 tarazlıq qiyməti arasında aşağıdakı münasibət ödənilməlidir: $R_c = (np/n_i^2)R_0$. Burada $n_i^2 = n_0 p_0$ - tarazlıq halında məxsusi konsentrasiyasının kvadratı, n və p - uyğun olaraq elektronların və deşiklərin qeyri-tarazlı konsentrasiyalarıdır.

İnyeksiyanın kiçik qiymətlərində, yəni $\Delta n, \Delta p \ll n_0, p_0$ olduqda yazmaq olar:

$$R_c = [(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p)]R_0 / n_0 p_0 = R_0 + \left(\frac{\Delta n}{n_0} + \frac{\Delta p}{p_0} \right) R_0 = R_0 + \Delta R \quad (7.11.5)$$

$\tau_s = \Delta n / \Delta R$ münasibətilə τ_s şüalanma yaşama müddəti anlayışını daxil edək. ΔR kəmiyyətini (7.11.5) münasibətinin köməyi ilə $\Delta R = \Delta n \left(\frac{1}{n_0} + \frac{1}{p_0} \right) R_0$ şəklində yazmaq olar. Onda şüalanma yaşama müddəti üçün yazı bilirik ki:

$$\tau_s = n_0 p_0 / [R_0 (n_0 + p_0)].$$

Onda məxsusi yarımkeçiricidə $n_0 = p_0 = n_i$ olduğundan alırıq:

$$\tau_s' = n_i / (2R_0); \quad R_0 = n_i / (2\tau_s');$$

n - tip yarımkeçiricidə ($n_0 \gg p_0$):

$$\tau_s' = p_0 / R_0 = \tau_s' 2p_0 / n_i > \tau_s'$$

p - tip yarımkeçiricidə ($p_0 \gg n_0$):

$$\tau_s' = n_0 / R_0 = \tau_s' 2n_0 / n_i > \tau_s'$$

Beləliklə şüalanma rekombinasiyasının sürəti və şüalanma yaşama müddəti yarımkeçiricidə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasından asılıdır. Lakin yarımkeçiricidə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını kifayət qədər geniş intervalda dəyişmək mümkün olduğundan, nə şüalanma rekombinasiyasının sürəti nə də şüalanma yaşama müddəti verilmiş yarımkeçiricinin daxili parametrləri ilə təyin olunan spesifik şüalanma qabiliyyətini xarakterizə etmir. Ona görə də şüalanma rekombinasiyasının effektivliyini xarakterizə etmək üçün B - şüalanma rekombinasiyası əmsalı adlanan kəmiyyət daxil edilir:

$$B = R_0 / n_i^2$$

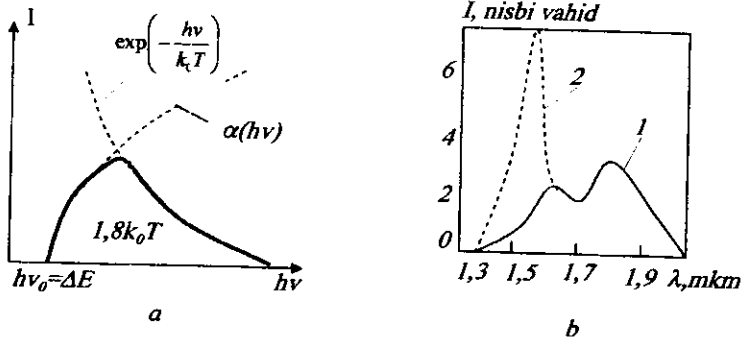
B kəmiyyətinin ölçü vahidi $[B] = [sm^3 / san]$. Bəzi yarımkeçiricilər üçün 300K temperaturda B kəmiyyətinin qiymətləri 4-cü cədvəldə verilmişdir.

Qeyd. Cədvəlin axırınıcı qrafasında τ_s üçün verilmiş qiymətlər əsas yükdaşıyıcıların $10^{17} sm^{-3}$ konsentrasiyasına uyğundur. Məxsusi zonalar arası şüalanma rekombinasiyasının spektrindəki xəttin formasını təhlil

edək. Müfəssəl tarazlıq prinsipinə uyğun olaraq, \bar{n} sındırma əmsalının tezlikdən zəif asılı olduğunu qəbul edib (7.11.4) düsturundan almaq olar:

$$R(\nu) \sim \nu^2 \alpha(\nu) e^{-h\nu/kT} \quad (7.11.6)$$

(7.4.4) düsturuna əsasən düzünə icazəli keçidlər üçün $\alpha \sim (h\nu - \Delta E)^{1/2}$. Onda zonalar arası şüalanma rekombinasiyası xəttinin forması üstlü (artan) və eksponensial (azalan) asılılıqların hasili ilə təyin olunacaqdır. Rekombinasiya şüalanmasının spektral xətti maksimumu olan qeyri-simmetrik əyridən ibarət olacaqdır. Rekombinasiya şüalanmasının maksimumunda fotonun enerjisinin qiyməti qadağan zonanın eninə uyğun gəlmir. Qadağan zonanın enini şəkil 7.27,a-da göstəriləyi kimi zonalararası rekombinasiya şüalanması zolağının uzun dalğalı sərhəddini sıfıra ekstrapolyasiya etməklə təyin etmək olar.



Şəkil 7.27. Düz zonalı yarımkəçiricidə zonalararası şüalanma rekombinasiyası: a - xəttin forması; b- Ge üçün rekombinasiya şüalanması spektri; 1- təcrübə əyri; 2 - özünə udulma düzəlişini nəzərə almaqla hesablanan əyri.

Şüalanma rekombinasiyası xəttinin forması elektron-deşik qarşılıqlı təsirini nəzərə almadan tədqiq olunmuşdur. Eksitonları və elektron-deşik qarşılıqlı təsirini nəzərə almaqla rekombinasiya şüalanması spektrinin təhlili məxsusi rekombinasiya şüalanması zolağının müəkkəb quruluşuna gətirib çıxarır. Baş kvant ədədinin kiçik ($n=1,2$) qiymətlərində eksiton xətlərinin udulma əmsalının qiyməti kifayət qədər böyük olduğu üçün (7.11.6) münasibətini nəzərə almaqla məxsusi şüalanma spektrində eksiton xətlərinin intensivliyi də (xüsusən $n=1$ halı üçün) böyük olacaqdır. Lakin təcrübə göstərir ki, nümunədən çıxan rekombinasiya şüalanmasının intensivliyi udulma sərhəddi yaxınlığında eksiton xətlərindən böyükdür. Şəkil 7.27,b-də germanium üçün zonalar arası rekombinasiya şüalanmasının spektri göstərilmişdir. $\lambda = 1,5 mkm$

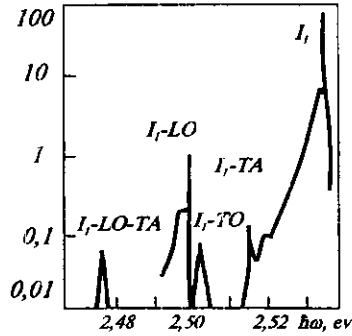
yaxınlığında intensivliyi məxsusi oblastdakı intensivlikdən kiçik olan pik müşahidə olunur. Bu effekti kristal mühitdə şüalanmanın udulması ilə izah etmək olar. İntensivliyi məxsusi şüalanma intensivliyindən böyük olan eksiton şüalanması nümunədən çıxana qədər daha güclü udulmaya məruz qalacaqdır, çünki udma spektrinin eksiton oblastında udma əmsalı böyük qiymətə malikdir. Əgər rekombinasiya şüalanmasının kristalda udulması effektini nəzərə alsaq, spektrin şəkli şəkil 7.27,b-də punktirle göstərilən kimi ciddi surətdə dəyişəcəkdir və eksiton xəttinin ($n=1$) intensivliyi rekombinasiya şüalanmasının məxsusi zolağından yüksəkdə olacaqdır.

Qeyd etmək lazımdır ki, eksiton şüalanma spektrinin şəkli temperaturdan əsaslı surətdə asılıdır. Temperatur artdıqca hərəkət edən eksitonların kinetik enerjisi artdığından onların spektral xətləri də genişlənir. Lakin bu sərbəst hərəkət edən eksitonlar üçün doğrudur. Belə eksitonlar çox təmiz yarımkəçiricilərdə müşahidə olunur. Əgər yarımkəçiriciyə aşqar vurulubsa eksitonlar aşqar atomları ilə **eksiton-aşqar kompleksi** yaradır. Aşqarla bağlı olan eksiton lokallaşmış olur və kristal boyunca yerini dəyişə bilmir. Ona görə də bağlı eksitonların şüalanma xətləri

çox ensizdir və onların eni temperaturdan asılı deyildir. Əgər aşqarın tipini dəyişək eksiton – aşqar kompleksinə uyğun olan xətlərin enerjisi də dəyişir. Məsələn, eksiton – neytral donor kompleksi üçün eksiton-donor kompleksinin ΔE_{d-dn} enerjisinin donorun ΔE_d enerjisinə nisbəti dəşiklərin və elektronların kütlələri nisbətinə uyğun olaraq $0,055 < \Delta E_{d-dn} / \Delta E_d < 0,33$ intervalında dəyişir. Aşağı sərhəd kütlələr nisbətinin $m_p^* / m_n^* \ll 1$ qiymətinə, yuxarı sərhəd isə $m_p^* / m_n^* \gg 1$ qiymətinə uyğundur. Silisium üçün empirik Xeyns qaydası çıxarılmışdır: $\Delta E_{d-dn} / \Delta E_d = 0,1$. Kütlələr nisbəti 4-ə yaxın olan $A''B''$ birləşməsi üçün $\Delta E_{d-dn} / \Delta E_d = 0,3$, kütlələr nisbəti ~ 10 olan $A'''B'''$ birləşməsi üçün isə $\Delta E_{d-dn} / \Delta E_d \approx 0,33$.

Eksiton-aşqar komplekslərinin xətləri çox vaxt fonon təkrarına malik olur ki, bu da elektronların şüalanma verən keçidlərində fononların və yaxud onların kombinasiyalarının iştirakı ilə əlaqədardır. 7.28-ci

I , nisbi vahid



Şəkil 7.28. CdS-də fotoluminessensiya spektri. I_1 - bağlı eksitonun fononsuz xətti. $\hbar\omega_{TO} = 0,034eV$; $\hbar\omega_{LO} = 0,0038eV$; $\hbar\omega_{TA} = 0,021eV$.

şəkilə 1,6 K temperaturda CdS -in fotoluminessensiya spektri verilmişdir. Bu şəkilə bağlı fononun J , ensiz xətti və LO -, TO -, TA - fononlarla və onların LO - TA kombinasiyaları ilə əlaqədar olan müxtəlif fonon təkrarlanmaları yaxşı seçilir.

Müxtəlif yolla aşqarlanmış yarımkəçiricilərin bağlı eksitonlarının şüalanma spektrlərini müşahidə etməklə aşqarların enerji səviyyələrini təyin etmək olar. Əfsuslar olsun ki, eksiton-aşqar kompleksi üçün nəzəriyyə hələlik dayaz hidrogenə bənzər aşqarlar üçün verilmişdir.

Biz artıq aşqar udulması spektrlərinə görə aşqarların müəyyənləşdirilməsinin mümkünlüyünü göstərmişdik. Lakin yarımkəçiriciyə aşqar udulmasını müşahidə etməyə kifayət edən konsentrasiyada hər cür aşqar vurmaq mümkün olmur. Aşqar udulmasında udma əmsalı kiçik olduğundan aşqar udulmasının aydın xətlərini almaq üçün aşqarın konsentrasiyası kifayət qədər olmalıdır. Lakin şüalanma keçidlərində aşqar səviyyələrini nisbətən kiçik aşqar konsentrasiyalarında da öyrənmək mümkündür.

Rekombinasiya şüalanması spektrinə görə aşqar səviyyələrinin energetik vəziyyətini təyin etmək üçün vacib olan aşqar şüalanma rekombinasiya xətlərinin formasına baxaq. Əgər dayaz aşqar səviyyələri mövcuddursa, onları aşqar-yaxın zona keçidlərinə görə deyil, aşqar-uzaq zona şüalanma keçidlərinə görə izah etmək əlverişlidir. Artıq göstəriləni kimi, bu halda aşqar udulması əmsal (7.6.3) asılılığına uyğundur. (7.6.3) şərtini rekombinasiya şüalanmasının spektral intensivliyi üçün olan (7.11.6) düsturunda yerinə yazsaq alarıq:

$$J(\nu) \sim [h\nu - (\Delta E - \Delta E_0)]^{1/2} e^{h\nu/k_B T} \frac{\nu^2}{\{1 + [h\nu - (\Delta E - \Delta E_0)]\}^4}$$

Burada ΔE_0 - aşqar səviyyəsinin valent zonasının tavanından hesablanan enerjisidir, xəttin formasını isə bu ifadədəki birinci iki vuruq – kökaltı və eksponensial vuruq təyin edir.

Aşqar şüalanma rekombinasiyasının spektral xəttinin forması zonalar arası şüalanma rekombinasiyası üçün 7.27-ci şəkilə göstərilənlər analogidir; fərq yalnız ondadır ki, bu aşqar zolağın kiçik enerjili astanası sərhəddi zonalar arası keçiddə olduğu kimi ΔE enerjisinə deyil $\Delta E - \Delta E_0$ enerjisinə uyğun olacaqdır: $h\nu_0 = \Delta E - \Delta E_0$. Təhlil göstərir ki, aşqar şüalanmasının xəttinin yarım eni (başqa sözlə, onun hündürlüyünün yarısındakı eni) $\sim 1,8k_B T$ -yə bərabər olur. Beləliklə, temperatur azaldıqca aşqar şüalanması xətləri ensizləşir. Fonon şüalanması nəticəsində aşağı energetik $h\nu_0$ astanasının vəziyyətini dəqiq təyin etmək çətin olduğundan aşqar səviyyəsinin energetik vəziyyətini bəzən aşqar zolağın maksimumuna görə təyin edirlər. Xəttin yarımeninin təyini üçün yuxarıda

aparılan hesablaşma göstörir ki, ΔE -nin tøyinindəki xəta $\sim k_0 T$ qədərdir və temperatur azaldıqca azalır.

Əgər qeyri-düzünə keçidli yarımkəçiricilərdə aşqar mövcuddursa, aşqar halları adətən zonaların ekstremumları ilə əlaqədar olduğundan yuxarıda təsvir olunan aşqar – uzaq zona keçidi də qeyri-düzünə olacaqdır. Qeyri-düzünə zonalı yarımkəçiricilərdə zonalar arası udulma kimi zonalar arası şüalanma rekombinasiyası da yalnız fononların iştirakı ilə gedə bilər. Aşqarların iştirakı ilə baş verən qeyri-düzünə keçidlərdə impuls artıqlığı və yaxud çatışmazlığı həm aşqar atomların lokal rəqsləri ilə, həm də kristal qəfəsin müxtəlif fononlarının iştirakı ilə kompensə oluna bilər. Məsələn, bor atomları ilə aşqarlanmış silisiumun aşqar şüalanması spektrində iki zolaq müşahidə etmək olar: bunlardan biri TA -fononların, digəri isə TO -fononların iştirakı ilə elektronların keçirici zonadan borun aşqar səviyyələrinə keçidinə uyğundur. Aşqarın ionlaşma enerjisi artdıqca elektronun aşqar atomu ilə rabitə enerjisi artır və qeyri-düzünə keçiddə elektronun artıq impulsunun aşqar atomuna verilmə ehtimalı artır, başqa sözlə, fononsuz aşqar keçidlərinin ehtimalı artır. Belə şüalanma keçidlərinin fononsuz keçidlərdə payı çox böyükdür (1-ə yaxındır). Ona görə də aşqarların konsentrasiyasını artırmaqla intensiv rekombinasiya şüalanması almaq üçün belə keçidlərdən istifadə etmək çox cəzbedicidir. Lakin lazım olan ionlaşma enerjisinə malik aşqarların həll olması çox azdır.

Qadağan zonası geniş olan $A''B''$ və $A'''B'''$ birləşmələrində sərhəd şüalanması adlanan və udulma sərhəddindən sonra yerləşən enli şüalanma zolağı böyük marağ doğurur. Sərhəd şüalanmasının və onun yarımkəçiricidəki aşqarların növündən və miqdarından asılılığının tədqiqi nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, o, donor-akseptor cütünün şüalanması modelinə əsasən yaxşı izah olunur. Bu şüalanma prosesi donor-akseptor cütünün işıq udmasının əksi olan prosesdir. 7.15-ci şəkildə GaP -də donor-akseptor cütünün fotoluminessensiya spektri verilmişdir.

Aşqarların şüalanma keçidlərinin intensivliyi şüalanma keçidləri verən aşqarların təkə konsentrasiyasından deyil, həm də qadağan zonadakı bu və qonşu aşqar səviyyələrin dolma dərəcəsindən asılıdır. Aşqar səviyyələrinin dolma dərəcəsi isə Fermi səviyyesinin qadağan zonadakı vəziyyətindən asılıdır. Əlavə aşqar vurmaqla və ya temperaturu dəyişməklə Fermi səviyyesinin vəziyyətini dəyişmək və bununla da aşqar şüalanma keçidlərinin intensivliyinə təsir etmək olar. Lüminessensiyanın termostimullaşdırılması və temperatur söndürülməsi prosesi lüminessensiyaya səbəb olan aşqar səviyyələrinin məhz yüklənmə halından asılıdır. Termostimullaşmış lüminessensiyanın və lüminessensiyanın temperatur söndürülməsinin tədqiqi yarımkəçiricilərdə

müxtəlif aşqar səviyyələrinin energetik vəziyyətləri və elektron və dəşiklərin zəbt etmə kəsikləri haqqında geniş məlumat verir.

Yarımqeçiricilərin və dielektriklərin tədqiqində tarixi olaraq iki anlayış daxil edilmişdir: lüminessensiya və rekombinasiya şüalanması. Kristalların foto – və elektrolüminessensiyası yarımqeçiricilər fizikasının əsası qoyulduğu vaxtdan xeyli əvvəl tədqiq olunmağa başlamışdı. Bərk cisimlərin zona nəzəriyyəsi və təcrübi tədqiqatlar inkişaf etdikcə aydın oldu ki, həm kristalların lüminessensiyası, həm də yarımqeçiricilərdə şüalanma rekombinasiyası eyni təbiətlidir: hər iki halda bərk cisimdə elektronların işıq enerjisi şüalandırmaqla bir enerji səviyyəsindən digərinə keçidi baş verir.

§7.12. Spontan və məcburi şüalanma. Yarımqeçirici lazerlər

Əgər elektronun E_2 səviyyəsindən E_1 səviyyəsinə keçidi xarici təsirlə baş verirsə belə keçid **məcburi keçid** adlanır. Əgər elektronun E_2 səviyyəsindən E_1 səviyyəsinə keçidi xarici təsir olmadan, özbaşına baş verirsə belə keçid **spontan keçid** adlanır. Aydındır ki, enerjinin saxlanma qanununa görə elektronun enerjisinin artması ilə bağlı olan keçid (məsələn, optik udulma nəticəsində baş verən keçid) yalnız məcburi keçid ola bilər. Elektronun enerjisinin azalması ilə bağlı olan keçid isə (məsələn, şüalanma keçidləri) həm spontan, həm də məcburi keçid ola bilər. Beləliklə, şüalanma rekombinasiyası həm spontan, həm də məcburi ola bilər. Məsələn, məcburi rekombinasiya enerjisi $E_2 - E_1 = h\nu$ enerjilər fərqiə bərabər olan fotonun təsiri ilə baş verə bilər (əgər E_2 - elektronun keçirici zonadakı enerjisi, E_1 - valent zonasındakı enerjisi olarsa).

T temperaturunda sistemdə fotonların $Q(\nu)$ sıxlığı (7.11.3) Plank paylanması ilə verilir. Enerjisi $h\nu_{12} = E_2 - E_1$ olan fotonların təsiri ilə cütlərin G_{12} generasiya sürəti aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$G_{12} = A_{12}N_1f_1N_2(1-f_2)Q(\nu_{12}), \quad (7.12.1)$$

burada $A_{12}Q(\nu_{12})$ - 1 halından 2 halına keçidlərin ehtimalı, N_1 və N_2 - 1 və 2 səviyyələrində hal sıxlıqları, f_1 - 1 halı üçün elektronların paylanma funksiyasıdır.

Onda N_1f_1 , $N_2(1-f_2)$ - uyğun olaraq elektronların aşağı səviyyədə və dəşiklərin yuxarı səviyyədə sıxlıqlarıdır. Rekombinasiya sürətini aşağıdakı kimi yazmaq olar:

$$R_{12} = A_{21}N_2f_2N_1(1-f_1)Q(\nu_{12}) + B_{21}N_2f_2N_1(1-f_1) \quad (7.12.2)$$

Burada birinci hədd məcburi rekombinasiyanı, ikinci hədd isə spontan rekombinasiyanı xarakterizə edir. Məcburi rekombinasiya

mövcud olan fotonların $Q(\nu_{12})$ sıxlığından asılıdır. Spontan rekombinasiya isə sistemdə mövcud olan fotonlardan asılı deyil və onun ehtimalı B_{12} əmsalı ilə təyin edilir.

Termodinamik tarazlıq halında generasiya sürəti rekombinasiya sürətinə bərabərdir, ona görə də (7.12.1) və (7.12.2) ifadələrinin bərabərliyindən alırıq:

$$A_{12}Q(\nu_{12})f_1(1-f_2)=[A_{21}Q(\nu_{12})+B_{21}]f_2(1-f_1)$$

Adətən $A_{12} = A_{21}$ olur. Onda alırıq:

$$f_1(1-f_2)/[f_2(1-f_1)] = \exp[(E_2 - E_1)/k_0T]$$

Nəticədə:

$$A_{21}Q(\nu_{12})\{\exp[(E_2 - E_1)/k_0T] - 1\} = B_{21}$$

Burada fotonların $Q(\nu_{12})$ sıxlığının (7.11.3) ifadəsinə yerinə yazsaq alırıq:

$$\frac{B_{21}}{A_{21}} = \left[\exp \frac{E_2 - E_1}{k_0T} - 1 \right] \frac{8\pi\tilde{n}^3(\nu_{12})^2}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu_{12}/k_0T} - 1}$$

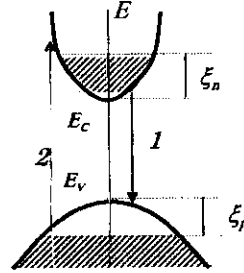
$E_2 - E_1 = h\nu_{12}$ olduğunu nəzərə alıb ixtisar aparsaq spontan və məcburi şüalanma əmsallarının nisbəti üçün alırıq:

$$\frac{B}{A} = \frac{8\pi\tilde{n}^3\nu^2}{c^3}$$

Bu nisbət şüalanmanın tezliyi artdıqca ν^2 kimi artır və yarımqeçiricidə \tilde{n} sındırma əmsalı böyük olduqca böyük olur. Bu proseslərin ehtimalları nisbəti aşağıdakı kimi ifadə olunacaqdır.

$$W_{\text{spont}}(\nu)/[W_{\text{mcc}}(\nu)] = B/[AQ(\nu)] = \exp(h\nu/k_0T) - 1$$

Məcburi rekombinasiya zamanı şüalanan fotonun tezliyi, istiqaməti və fazası bu rekombinasiyanı yaradan fotonunki ilə eynidir. Spontan rekombinasiya zamanı isə şüalanan fotonların istiqamətləri və fazaları müxtəlif, enerjiləri isə onu yaradan fotonların enerjiləri ilə eyni olur. Tarazlıq halında əsasən spontan şüalanma baş verir. Sistem tarazlıq halında deyil həyəcanlanmış halda olarsa elektronların rekombinasiya sürəti artar, başqa sözlə fotonların generasiya sürəti və sistemdəki fotonların orta sayı artar. Fotonların sayının artması ilə məcburi şüalanma rekombinasiyasının sürəti də artır,



Şəkil 7.29. $\Delta E \leq h\nu \leq \Delta E + \epsilon_n + \epsilon_p$ enerji intervalında udulmanın tamamilə olmadığı ideallaşdırılmış halda yarımqeçiricinin zonalarının invers dolması: 1 - şüalanma; 2 - udulma.

lakin sistemdə fotonların udulması da artacaqdır. Məcburi şüalanmanın intensivliyinin hansı şəraitdə udulma intensivliyindən çox olacağını araşdırmaq. Son nəticədə bu monoxromatik koherent şüalanmanın intensivliyinin artmasına və lazer şüalanmasına gətirib çıxarır.

Yuxarı və aşağı enerji səviyyələrinin dolma dərəcəsindən asılı olaraq məcburi şüalanma ilə udulma arasındakı münasibətə baxaq. Məcburi şüalanmanın və udulmanın düzünə zonalı yarımkəçiricidə baş verdiyini fərz edək. Bu yarımkəçiricidə zonalarda yükdaşıyıcıların paylanması şəkil 7.29-da göstərildiyi kimi olsun. Enerjinin ştrixlənmiş oblastları dolmuş səviyyələrə uyğun gəlir. Şəkildən görünür ki, belə sistemdə enerjisi $\Delta E \leq h\nu \leq \Delta E + \xi_n + \xi_p$ intervalda olan fotonların udulması mümkün deyildir. Kvantomekaniki hesablamalar göstərir ki, sistemdə $\xi_n + \xi_p \geq 2k_0T$ şərti ödənilərsə məcburi rekombinasiyanın sürəti udulmanın intensivliyindən böyük olar. Yuxarı enerji səviyyələrində məskunlaşmanın aşağı enerji səviyyələrdəki məskunlaşmadan böyük olduğu paylanma **invers paylanma** adlanır. Səviyyələrin müvafiq məskunlaşmasına isə **invers məskunlaşma** deyilir. Beləliklə məcburi şüalanmanın güclənməsi üçün şərtlərdən biri yarımkəçiricidə **invers məskunlaşmanın** yaradılmasıdır. Spektral paylanmanın maksimumunda fotonların sayı ən çox olacaqdır, ona görə də bu tezlikdə baş verən məcburi keçidlərin sayı daha sürətlə artacaqdır və bunun nəticəsində də xətlər və şüalanma spektri nazikləşəcəkdir. Spektrin maksimumunda şüalanma intensivliyinin bu artmasına **güclənmə** deyilir. Əgər şüalanmanın intensivliyi həyəcanlanma səviyyəsindən asılı olaraq ifrat xətti artırsa proses **ifrat şüalanma** adlanır. Lakin şüalanma qeyri-koherent olaraq qalır, çünki bütün fazalı şüaların güclənməsi baş verir.

Şüalanmanın koherentliyini yaratmaq üçün müəyyən fazalı şüalanmanı ayıra bilən xüsusi şərait yaratmaq lazımdır. Bunun üçün sistemi müəyyən uzunluqlu dalğalar üçün durğun dalğa yaradan rezonatorda yerləşdirmək lazımdır. Rezonator iki paralel əks etdirici müstəvidən – güzgüden ibarət sistemdir. Güzgülər arasındakı məsafə ele seçilir ki, onların arasında tam sayda yarımdalğa yerləşsin. Bu şərti belə yazmaq olar:

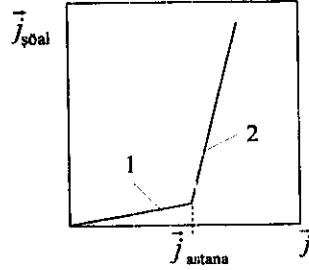
$$m\lambda/(2\tilde{n}) = \ell, \quad (7.12.3)$$

burada m - tam ədəd, λ - şüalanmanın dalğa uzunluğu, \tilde{n} - sındırma əmsali, ℓ - rezonatorun uzunluğudur.

Bu şərt rezonatorda durğun dalğalar yaradan rəqslərin modalarını təyin edən dalğa uzunluqlarının müəyyən dəsti üçün ödəniləcəkdir. Modalar arasındakı məsafə aşağıdakı şərtlə veriləcəkdir:

$$\Delta\lambda = \lambda^2 / [2\ell(\tilde{n} - \lambda d\tilde{n} / d\lambda)].$$

Höyəcənlanma səviyyəsinin artması ilə höyəcənlanma astanasından keçə bilib keçə bilməməsindən asılı olaraq şüalanmanın intensivliyi müxtəlif cür artır. Höyəcənlanma astanası höyəcənlanma səviyyəsinə təyin edir. Höyəcənlanma səviyyəsi bu səviyyədən aşağı olduqda şüalanma spontan şüalanmadır, yuxarı olduqda isə əsasən məcburi şüalanma olur və onun intensivliyi höyəcənlanma səviyyəsi artdıqca kəskin artır. $p-n$ keçiddən düzünə cərəyan axarkən inyeksiya yolu ilə höyəcənlanma nəticəsində baş verən şüalanmanın intensivliyinin höyəcənlanma səviyyəsindən asılılığı 7.30-cu şəkildə verilmişdir. Bu halda höyəcənlanma səviyyəsinin ölçüsü olaraq $p-n$ keçiddən axan cərəyanın sıxlığını götürmək olar. Höyəcənlan-



Şəkil 7.30. Höyəcənlanma səviyyəsindən (dərəcəsinə) asılı olaraq yarımkəçirici lazerin şüalanma gücü: 1 – spontan şüalanma; 2 – məcburi şüalanma.

ma astanasından böyük qiymətlərdə şüalanma koherent olmaya bilər, onda lazer şüalanması deyil ifrat şüalanma olur. Koherentlik dərəcəsi rezonatorun elə keyfiyyəti ilə təyin olunacaq ki, o şüalanmanın müəyyən modalarının üstün güclənməsini təmin etsin.

İnvers məskunlaşma hallarını təmin etmək üçün seçilmiş höyəcənlandırma üsulundan asılı olaraq yarımkəçirici lazerlərin aşağıdakı təsnifatını vermək olar: $p-n$ keçiddə inyeksiya yolu ilə höyəcənlandırılan yarımkəçirici kvant generatorları; doldurulması münasib dalğa uzunluqlu və böyük intensivlikli işıqla təmin olunan lazerlər; elektron dəstəsilə höyəcənlandırılan lazerlər.

§7.13 Fotokeçiricilik

İşıqlanmanın təsiri ilə yarımkəçiricinin elektrik xassəsinin dəyişməsinə fotoelektrik effekti deyilir. İlk növbədə söhbət işıqlanmanın təsiri ilə yarımkəçiricinin elektrik keçiriciliyinin dəyişməsindən gedəcəkdir. Bu hadisə **fotokeçiricilik** adlanır. Bundan başqa işıqlanan yarımkəçiricidə hər hansı üsulla qeyri-bircinslilik və beləliklə də Fermi səviyyəsinin qradiyenti yaradıldıqda yarımkəçiricilərdə müxtəlif fotovoltaiq effektlər meydana çıxır. Bu effektlərin ümumi cəhəti ondan ibarətdir ki, işıqlanmanın təsiri ilə yarımkəçiricidə e.h.q yaranır. $p-n$ keçiddə foto-e.h.q., Dember e.h.q., fotomaqnit e.h.q. və ya başqa cür

desək Kikoin-Noskov TEM-effekti (fotoelektromaqnit effekti) və bir sıra başqa hadisələr fotovoltaiik effektlərdir.

Yarımkəçiricilərdə işıqlanmanın təsiri ilə bütün bu effektlərin yaranması üçün əsas şərt kristalda işığın **fotoelektrik fəal udulmasının** baş verməsidir. Fotoelektrik fəal udulma dedikdə işığın udulması nəticəsində yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının və yaxud bezi hallarda yürüklüyünün dəyişməsi nəzərdə tutulur.

Bildiyimiz kimi, yükdaşıyıcıların konsentrasiyası məxsusi və ya aşqar generasiyası hesabına baş verə bilər. Fotoelektrik hadisələrində məxsusi və ya aşqar generasiyası kristalın işıqlandırılması nəticəsində əldə olunur. İşığın təsiri ilə yükdaşıyıcıların enerji halları dəyişərsə işıqlanma yükdaşıyıcıların yürüklüyünü də dəyişər. Bu zaman yükdaşıyıcıların effektiv kütləsi və yaxud relaksasiya müddətinin dəyişməsi ilə nəticələnən yükdaşıyıcıların səpilmə xarakteri də dəyişir.

İşıqlanma nəticəsində yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsi hadisəsi geniş tədqiq olunur və artıq texnikada tətbiq olunur. Ona görə də biz məhz belə fotoelektrik hadisələrlə bağlı olan xüsusiyyətlər üzərində dayanacağıq.

İşığın təsiri nəticəsində əmələ gələn əlavə elektronların konsentrasiyası Δn və deşiklərin konsentrasiyası Δp olarsa keçiriciliyin dəyişməsinə belə yaza bilərik:

$$\Delta \sigma_{\text{iq}} = e_n \mu_n \Delta n + e_p \mu_p p,$$

$\Delta \sigma_{\text{iq}}$ - işıq keçiriciliyi adlanır.

$\Delta \sigma_{\text{iq}} > 0$ olarsa effekt **müsbət fotorezistiv effekt**,

$\Delta \sigma_{\text{iq}} < 0$ olarsa **mənfi fotorezistiv effekt** adlanır.

Tarazlıqda olan yükdaşıyıcıların keçiriciliyi (ışıqlanma olmadıqda) **qaranlıq keçiriciliyi** (σ_q) adlanır:

$$\sigma_q = e \mu_n n_0 + e \mu_p p_0.$$

İşıqlanma nəticəsində olan tam keçiricilik aşağıdakı cəmə bərabərdir:

$$\sigma = \sigma_{\text{iq}} + \sigma_q \quad (7.13.1)$$

Fotokeçiricilik hadisəsini nəzəri izah etmək üçün işığın təsiri ilə yaranan yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının zamana və fəzaya görə paylanması bilmək lazımdır. Bunu isə müxtəlif sərhəd və başlanğıc şərtləri verməklə elektronlar və deşiklər üçün kəsilməzlik tənliklərini həll etməklə tapmaq olar. Kəsilməzlik tənliyinin ən ümumi həlli mümkün deyildir, çünki rekombinasiya sürəti üçün konkret ifadənin seçilməsi mümkün deyil və generasiya sürəti konkret xarici şərtlərlə, istifadə edilən işığın dalğa uzunluğu ilə və kristalda yükdaşıyıcıların rekombinasiya

mexanizmləri ilə təyin olunur. Ona görə də hər bir konkret halda bu hala uyğun kəsilməzlik tənliyini həll etmək lazımdır.

Fotokeçiriciliyi müxtəlif şərtlər daxilində öyrənmək olar. Lakin əsas rejimlər aşağıdakılardır: stasionar fotokeçiricilik rejimi və fotokeçiriciliyin kinetikası rejimi (başqa sözlə fotokeçiriciliyin zamandan asılılığı). Fotokeçiriciliyin spektral asılılığının və bu asılılığın temperatura və əlavə işıqlanmanın təsiri ilə dəyişməsinin tədqiqi və fotokeçiriciliyin artmasının və azalmasının tədqiqi yarımkeçiricinin zona quruluşunun, dərin və dayaz aşqarların enerji səviyyələrinin, onların fotoionizasiya kəsiyinin və yükdaşıyıcıları tutma kəsiyinin, yükdaşıyıcıların yaşama müddətinin və s. tədqiqi üçün güclü alətdir.

Fotokeçiriciliyin spektral xarakteristikaları verilmiş yarımkeçiricidə təsir göstərən işıqın udulma mexanizmləri və işıqın təsiri ilə generasiya olunan yükdaşıyıcıların rekombinasiyası ilə təyin olunur. Optik udulmanın elə mexanizmləri fotoelektrik fəal mexanizm olacaqdır ki, bu mexanizmlər keçirici zonadakı, yaxud valent zonasındakı və yaxud da hər iki zonadakı yükdaşıyıcıların konsentrasiyasını dəyişsin.

İşıqın əsas udulma mexanizmlərini bilərək, onların içindən fotoelektrik fəal mexanizmləri seçə bilərik: məxsusi və aşqar udulması və eksiton udulması. Eksiton udulması özlüyündə sərbəst yükdaşıyıcılar yaratmır. Eksiton – neytral sistemdir və elektrik keçiriciliyində bilavasitə iştirak edə bilməz. Lakin eksitonun istilik parçalanması nəticəsində (qeyd edək ki, eksitonların rabitə enerjisi $\sim 0,01eV$ -dir) daşıyanlar cütü – keçirici zonada elektron və valent zonasında dəşik yaranır ki, bunlar da elektrik keçiriciliyin artmasına səbəb olur.

İşıqın udulma mexanizmlərindən elələri vardır ki, onlar yükdaşıyıcıların yürüklüyünün dəyişməsinə və buna görə də yarımkeçiricinin elektrik keçiriciliyinin dəyişməsinə səbəb olur. Məsələn, sərbəst elektronların və ya dəşiklərin işığı selektiv udması onların effektiv kütlələrinin dəyişməsinə, sərbəst yüklərin zona daxili udması sərbəst yüklər qazının qızmasına və relaksasiya müddətinin dəyişməsinə səbəb olur. Fotokeçiriciliyin kəmiyyət xarakteristikası – **fotohəssaslıqdır**. Fotohəssaslığı təyin etməyin bir neçə üsulu vardır və ona görə də bunun üzərində daha ətraflı dayanmaq lazımdır.

Adətən fotohəssaslıq dedikdə vahid intensivlikli işıqlanmanın yaratdığı fotokeçiricilik nəzərdə tutulur. Xüsusi fotohəssaslıq adlanan kəmiyyətin vahidi $[sm/(Om \cdot Vt)]$ -dir və fotokeçiriciliyi elektrodlar arasındakı sahəyə vurub udulan işıqın gücünə bölməklə alınır. Əgər gərginliyin və ya işıqın intensivliyinin dəyişməsi ilə fotokeçiricilik xətti dəyişirsə xüsusi fotohəssaslıq tətbiq olunan gərginlikdən və ya işıqın intensivliyindən asılı olmayacaqdır. Xüsusi fotohəssaslıq verilmiş

maddənin xassəsinə xarakterizə edir. Onun yūkdəşiyicilərin yaşama müddəti və yūrüklüyü ilə mütənəşib olduğunu göstərək.

Əgər generasiya sürəti G olarsa, həyəcanlanma səviyyəsinin böyük olmaması və xətti rekombinasiya şərtləri daxilində yaranan yūkdəşiyicilərin əlavə konsentrasiyası stasionardır və aşağıdakı kimi yazılır:

$$\Delta n = G\tau_n; \Delta p = G\tau_p \quad (7.13.2)$$

Burada τ_n, τ_p - elektronların və deşiklərin yaşama müddətidir. (7.13.2) ifadəsini (7.12.3) düsturunda yerinə yazsaq alarıq:

$$\Delta\sigma_{\text{iq}} = Ge(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p) \quad (7.13.2a)$$

Məlumdur ki, generasiya sürəti vahid zamanda vahid həcmdə yaranan cütlərin sayına bərabərdir. Ona görə də:

$$G = \eta\alpha J_0(1 - R)$$

burada J_0 - nümunənin vahid səthinə düşən işığın intensivliyi, R - əksolma əmsali, α - udma əmsali, η - bir foton udularkən yaranan cütlərin sayını təyin edən kvant çıxışıdır.

Onda, yuxarıda göstərilən kimi, β xüsusi fətohəssaslığı

$$\beta = \Delta\sigma_{\text{iq}} S / (J_0)_{\text{km}}$$

kimi təyin edirik. Burada S - elektrodlar arasındakı sahədir (faktiki olaraq bu işıqlandırılan sahədir); $(J_0)_{\text{km}}$ - nümunənin bütün işıqlandırılan səthinə düşən işığın tam intensivliyidir.

(7.12.3) ifadəsini (7.13.2a) düsturunda yerinə yazsaq və (7.13.2) şərtini və $(J_0)_{\text{km}} = J_0 S$ olduğunu nəzərə alsaq:

$$\beta = \eta\alpha J_0(1 - R)e(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p)S / (J_0)_{\text{km}} = \eta\alpha(1 - R)e(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p).$$

alınır.

Beləliklə, fətohəssaslıq yarımkəçiricinin əsas parametrləri ilə - yūkdəşiyicilərin yaşama müddəti və yūrüklüyü, işığın verilmiş spektral oblastda udulma və əks olma (qaytarma) əmsalları, fətoionlaşmanın kvant çıxışı ilə təyin olunur.

Fotorezistiv detektorların fətohəssaslığını xarakterizə etmək üçün infraqırmızı texnikada praktiki olaraq β fətohəssaslığından daha vacib olan bir kəmiyyətdən istifadə olunur. Bu kəmiyyət detektorun küyünə bərabər olan siqnal almaq üçün lazım olan şüalanma gücünə bərabərdir. Fotorezistiv detektor - üzərinə düşən işığın təsiri ilə müqavimətin dəyişməsinə əsaslanan işıq şüalanması qəbul edicisidir. Fəto qəbuledici dövrdə küyün yaranmasına səbəb müxtəlif kontakt hadisələri, yūkdəşiyicilərin konsentrasiyasının və düşən işığın intensivliyinin flüktuasiaları, ətraf mühitin istilik şüalanmasının flüktuasialarıdır. Belə

yaxınlaşmada «fotohəssaslıq» ifadəsi çox vaxt siqnal-küy münasibəti ilə əlaqələndirilir.

Çox vaxt fotokeçiricilərin fotohəssaslığı 1 saniyədə udulan hər bir fotonun yaratdığı yükdaşıyıcılardan elektrodlar arasında 1 saniyədə keçənlərin sayı kimi təyin olunur. Buna **fotoelektrik gücləndirmə** (K) deyilir və $KGV = \Delta J_{\text{iq}} / e$ ifadəsi ilə təyin olunur. Burada ΔJ_{iq} - işıqlanma təsiri ilə cərəyan artımı, G - işıq generasiya sürəti, V - fotokeçiricinin həcmidir.

Nəzərdə tutulur ki, generasiya bütün həcm üzrə bərabər sürətlidir, başqa sözlə α udulma əmsalının çox da böyük olmadığı hala baxılır.

K güclənməni sərbəst yükdaşıyıcıların yaşama müddətinin yükdaşıyıcıların elektrodlar arası məsafəni getmək üçün lazım olan müddətə (dreyf müddətinə və ya uçuş müddətinə) nisbəti kimi də ifadə etmək olar:

$$K = \tau_n / t_n + \tau_p / t_p,$$

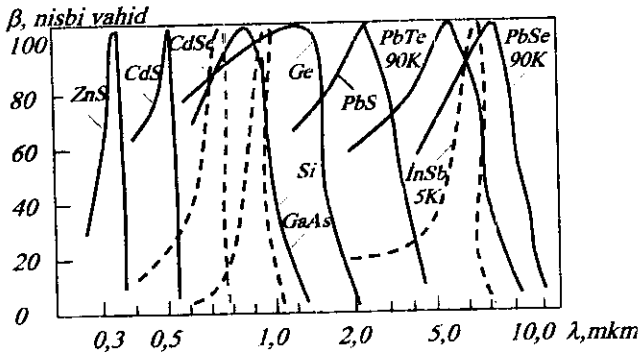
burada t_n və t_p - elektronların və deşiklərin uçuş müddətidir.

Əgər elektrodlara tətbiq olunmuş potensiallar fərqi $U = |\bar{E}|L$ (L - nümunənin elektrodlar arasındakı uzunluğu, \bar{E} - nümunədə biricinsli elektrik sahəsinin intensivliyi) olarsa, onda:

$$t_{n,p} = L / (\mu_{n,p} |\bar{E}|) = L^2 / (\mu_{n,p} U)$$

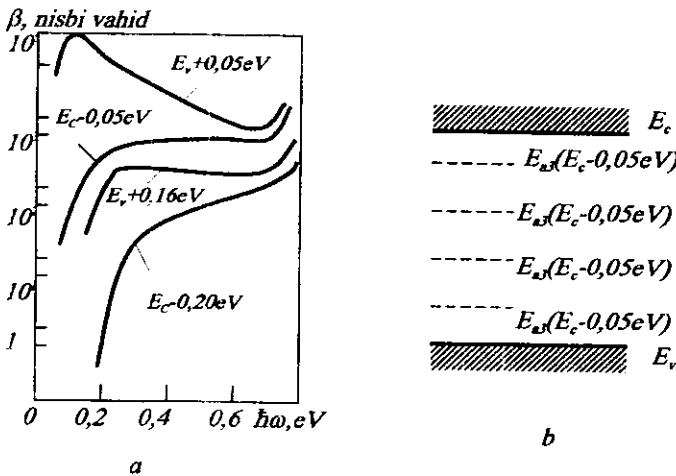
olar. Beləliklə K güclənmənin ifadəsi aşağıdakı şəkildə olacaqdır:

$$K = (U / L^2) (\tau_n \mu_n + \tau_p \mu_p).$$



Şəkil 7.31. Bir sıra yarımkəçiricilər üçün nisbi fotohəssaslığın spektral əyriləri (normallaşdırma əyriləri).

Fotokeçiriciliyin kəmiyyət xarakteristikasının seçilməsi təcrübə tədqiqatın məqsədi və fotokeçiriciliyin ölçülməsində istifadə olunan sxemlə təyin olunur. Fotokeçiricilik hadisəsi həm yarımkəçiricilər fizikasında güclü tədqiqat aləti kimi, həm də geniş texniki tətbiqə malik olan hadisə kimi diqqəti çoxdan cəlb edir. Bu sahədə çoxlu sayda tədqiqat işləri görülmüş və çox geniş əhatəli təcrübə materialı əldə edilmişdir. Fotokeçiricilik fizikasında bir çox fiziki hadisələr nəzəri cəhətdən hələ kifayət qədər izah olunmamışdır. Lakin qeyd etmək lazımdır ki, fotokeçiriciliyin tədqiqi nəticəsində zona quruluşunun və aşqar səviyyələrin müxtəlif xüsusiyyətləri və yarımkəçiricilərdə tarazsız hadisələrin xarakteristikaları haqqında məlumatlar almaq mümkün olmuşdur.



Şəkil 7.32. *a* - germaniumda qızıl aşqarların dörd səviyyəsi ilə əlaqədar olan nisbi fətohəssaslıq spektri; *b* - germaniumda qızıl aşqarların enerji səviyyələri sistemi.

7.31-ci şəkildə misal olaraq bəzi yarımkəçiricilərin məxsusi fotokeçiricilik spektri verilmişdir. Göründüyü kimi məxsusi fətohəssaslığın spektral oblastı yarımkəçiricinin qadağan zonasının eni ilə təyin olunur. Fətohəssaslığın uzundalgalı sərhəddi məxsusi udulma sərhəddinə uyğun gəlir. Qısa dalğalı sərhəddə həssaslığın düşməsi fotonların udulma əmsalının böyük qiymətlərində məxsusi udulmanın dərinliklərində yükdaşıyıcıların generasiya sürətinin azalması ilə izah olunur.

7.32-ci şəkildə qızıl aşqarlı germaniumun fotokeçiricilik spektri göstərilmişdir. Bu, digər aşqarlarla aşqarlanma şəraitindən asılı olaraq eyni bir aşqarın fotokeçiricilik hadisəsində özünü müxtəlif cür aparmasını nümayiş etdirən maraqlı bir misaldır. Germaniuma vurulmuş qızıl aşqarları qadağan zonada 7.32.b şəkildə göstəriləndiyi kimi dörd səviyyə yaradır. Qızıldan başqa heç bir aşqarı olmayan nümunənin aşağı temperaturlarda xassələri $E_{a1} = E_v + 0,16eV$ akseptor səviyyəsinin ionlaşması nəticəsində valent zonasında dəşiklərin yaranması ilə təyin olunmalıdır. Əgər germaniumda III qrup aşqarlar mövcud olarsa, onda $E_d = E_v + 0,05eV$ donor səviyyəsinin III qrup akseptorları ilə kompensasiyası baş verir. Əgər III qrup aşqarlarının konsentrasiyası qızıl atomlarının konsentrasiyasından az olarsa, valent zonasındakı elektronların boş donor səviyyələri tərəfindən tutulması nəticəsində dəşiklər əmələ gələcəkdir. Fotokeçiricilikdə yuxarıda yerləşən iki akseptor səviyyələrinin mövcudluğunu aşkar etmək üçün germaniuma V qrup aşqarları vurmaq lazımdır. Bu aşqarlardan (donorlardan) elektronlar ardıcıl olaraq akseptor səviyyələrini tuturlar və bunun nəticəsində elektronların yuxarıdakı akseptor səviyyələrindən işığın təsiri ilə keçirici zonaya keçidi baş verir. $E_{a1} = E_v + 0,16eV$ səviyyəsi daha çox tətbiq olunur. Bu səviyyə ilə əlaqədar olan aşqar fotokeçiriciliyinin spektrinin sərhəddi $\lambda = 9\text{mkm}$ dalğa uzunluğuna uyğun gəlir. Qızıl aşqarlı germanium əsasında spektrin infraqırmızı hissəsi üçün fotodetektorlar hazırlanır. Müasir infraqırmızı spektroskopiyada müxtəlif materiallardan hazırlanmış və məxsusi və aşqar fotorezistiv effektdə əsaslanan geniş çeşidli fotoqəbuledicilərdən istifadə olunur. Yarımkeçiricilərdə fotovoltaiq hadisələrə əsaslanan fotoqəbuledicilər də düzəltmək mümkündür.

§7.14 Yarımkeçiricilərdə fotovoltaiq hadisələr

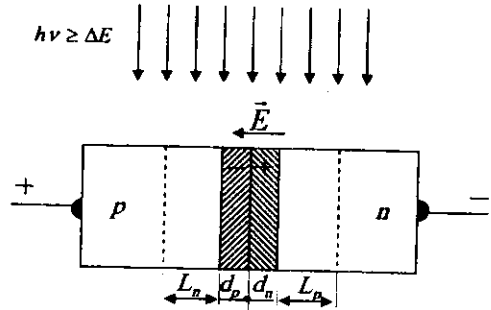
İşığın təsiri ilə yarımkeçiricidə e.h.q.-nin yaranmasına fotovoltaiq hadisə deyilir. İşığın təsiri ilə yarımkeçiricidə əlavə yükdaşıyıcılar yaranır. Bütün fotovoltaiq hadisələrin ümumi cəhəti ondan ibarətdir ki, kristalda daxili lokal elektrik sahəsi yaranır və işığın təsiri ilə generasiya olunan yükdaşıyıcılar bu sahədə hərəkət edərək və toplanaraq həcmi yüklər yaradır. Nəticədə foto-e.h.q. yaranır.

Daxili sahə yarımkeçiricinin qeyri-bircins aşqarlanması ilə (məsələn, $p-n$ keçidlərdə), kristalın tərkibinin dəyişməsi ilə (heteroqəbid halı), səth hadisələri ilə (məsələn Şottki çəpəri) əlaqədar yarana bilər.

$p-n$ keçidi işıqlandırmaqla foto-e.h.q.-nin yaranmasına bir qədər ətraflı baxaq. Əvvəllər termodinamik tarazlıq halında $p-n$ keçidin zona diaqramı (şəkil 6.10,a) və voltamper xarakteristikası (şəkil 6.11) verilmişdi. Termodinamik tarazlıq halında $p-n$ keçiddə potensial çəpər və daxili elektrik sahəsi yaranır. Bu elektrik sahəsi yarımkəçiricinin həcmi ilə ekranlanır və e.h.q. yaratmır. Əgər $p-n$ keçidə xarici mənbədən düzünə istiqamətdə gərginlik tətbiq etsək (xarici sahə $p-n$ keçidin daxili sahəsinin əksi istiqamətindədir), potensial çəpərin hündürlüyü azalar və $p-n$ keçiddən axan cərəyan gərginlikdən asılı olaraq eksponensial qanunla artır. Burada tarazsız hal - $p-n$ keçiddən \bar{j} cərəyanının axması - xarici V potensiallar fərqi tətbiqi nəticəsində baş verir və volt-ampere xarakteristikası aşağıdakı şəkildə olur:

$$\bar{j} = \bar{j}_s (e^{-eV/kT} - 1) \quad (7.14.1)$$

Burada $V < 0$ qiymətləri düzünə gərginliyə uyğundur. Əgər $p-n$ keçidə gərginlik tətbiq olunmayıbsa, tarazlıq halında $p-n$ keçid oblastında elektronların və deşiklərin bir-birini kompensə edən cərəyanları axır: aşqarlanma nəticəsində meydana çıxan qradiyent hesabına yaranan diffuziya cərəyanı və $p-n$ keçidin potensial çəpərinin yaratdığı daxili sahənin hesabına yaranan dreyf cərəyanı.



Şəkil 7.33. İşıqlandırılmış $p-n$ keçidin sxemi

Yekun cərəyan sıfır bərabər olacaqdır. İndi fərz edək ki, yarımkəçirici enerjisi yükdaşıyıcıların məxsusi generasiyasını təmin edən fotonlarla ($h\nu \geq \Delta E$) işıqlandırılır. Onda işığın təsiri ilə yaranmış əlavə elektron-deşik cütləri $p-n$ keçidin daxili sahəsi mövcud olan oblastın müxtəlif tərəflərinə dreyf edəcəklər və beləliklə əlavə yükdaşıyıcılar bir-birindən ayrılacaqlar. Lakin yalnız $p-n$ keçid oblastında yaranan cütlər deyil, həm də $p-n$ keçiddən diffuziya məsafəsindən kiçik məsafədə mövcud olan əksər cütlər də bir-birindən ayrılacaqlar; çünki $p-n$ keçid yaxınlığında əlavə yüklərin konsentrasiyasının qradiyent yarandığından qeyri-əsas yükdaşıyıcılar $p-n$ keçidə tərəf diffuziya edərək keçidin

sahəsi tərəfindən cəzb olunacaqlar. $p-n$ keçidin sahəsi keçidin hər iki tərəfindən diffuziya məsafəsində olan qeyri-əsas yükdaşıyıcıları yığacaqdır (şəkil 7.33).

Beləliklə, gördük ki, işıqlanma nəticəsində $p-n$ keçiddən elektronların və deşiklərin bir-birini kompensə edən tarazlı cərəyanlarından əlavə işıqın təsiri ilə yaranan yükdaşıyıcıların cərəyanı da axır. Bu cərəyanın axma şərtini (7.14.1) tənliyi ilə təsvir etmək olar, lakin \bar{j}_j və ona uyğun olan $p-n$ keçiddəki V_j potensiallar fərqi xarici mənbəyin e.h.q. hesabına deyil, işıqlanma hesabına alınır:

$$\bar{j}_j = \bar{j}_s(e^{-eV_j/kT} - 1) \quad (7.14.2)$$

Deməli işıqlandırılan $p-n$ keçidin özü e.h.q. (daha dəqiq foto – e.h.q.) mənbəyi olur. Açıq dövredəki potensiallar fərqi (açıq dövrə gərginliyi) V_j -yə, dövrə qısa qapandıqda dövredəki qısa qapanma cərəyanı \bar{j}_j -yə bərabər olacaqdır.

Qeyri-əsas yüklərin diffuziya məsafəsinin $p-n$ keçidin həcmi yüklər oblastlarının qalınlığından xeyli böyük olduğunu fərz edərək \bar{j}_j qısa qapanma cərəyanını qiymətləndirmək olar. Onda $\bar{j}_j = e(L_n + L_p)GS$. Burada S - $p-n$ keçidin sahəsi, G - cütlərin generasiya sürətidir.

Beləliklə qısa qapanma cərəyanı işıqlanmanın intensivliyindən asılı olaraq xətti qanunla artmalıdır (generasiya sürəti işıqlanmanın intensivliyi ilə mütənasibdir). Açıq dövrə gərginliyi isə (7.14.2) düsturuna uyğun olaraq işıqlanma intensivliyi artdıqca artan \bar{j}_j cərəyanından asılı olaraq loqarifmik qanunla artır. Əgər işıqlandırılan $p-n$ keçidin (fotodiodun) xarici dövrəsinə müəyyən bir müqavimət qoşsaq, xarici dövredəki fotocərəyan qısa qapanma cərəyanından kiçik olacaqdır, müvafiq olaraq $p-n$ keçiddəki fotogərginlik də azalacaqdır. Onda xarici dövrəsində müqavimət olan fotodiodun volt-ampere xarakteristikası aşağıdakı şəkildə olacaqdır:

$$\bar{j} = \bar{j}_j - \bar{j}_s(e^{-eV/kT} - 1)$$

İşıqlanmanın intensivliyi artdıqca foto-e.h.q. doyma qiymətinə yaxınlaşacaqdır. Foto-e.h.q. doyma qiyməti isə işıqlandırılmamış $p-n$ keçidin potensial çəpərinin hündürlüyü ilə təyin olunur ki, bu da yarımqeçiricinin qadağan zonasının eni ilə məhdudlaşır.

Fotodiod işıq enerjisini elektrik enerjisinə çevirən cihaz kimi istifadə oluna bilər. Əgər fotodiod günəşin işıq enerjisini elektrik enerjisinə çevirmək üçün hazırlanıbsa ona günəş batareyasının elementi deyilir. Günəş batareyası adətən çoxlu sayda ayrı-ayrı elementləri paralel və ardıcıl birləşdirməklə ayrıca blok şəklində yığılır. Günəş batareyası

elementinin ən vacib parametri – onun f.i.ə. və çıxış gücüdür. Batareya elementinin hazırlandığı yarımkeçiricinin qadağan zonasının eni artdıqca maksimal foto-e.h.q. artır, doyma cərəyanı j , isə azalır; lakin yükdaşıyıcılar yaradan fotonların sərhəd enerjisi artır, günəş işığı spektrinin faydalı istifadə olunan hissəsi azalır. Ona görə də günəş batareyası hazırlanan yarımkeçiricinin qadağan zonasının eni müəyyən optimal qiymətə malik olmalıdır. Kosmos üçün bu $1,6 eV$, atmosferdə işığın udulmasını nəzərə almaqla yer səthində $1,5 eV$ -dur. Rekombinasiya zamanı baş verən itkini (düşən enerjinin $\sim 1/3$ hissəsi) və əksolma zamanı baş verən itkini (düşən enerjinin $\sim 1/3$ hissəsi) nəzərə alsaq $\Delta E = 1 + 1,5 eV$ intervalda olduqda günəş batareyasının maksimal f.i.ə. $\sim 40\%$ -ə çata bilər. Silisiumda f.i.ə. 14% -ə yaxın almaq mümkün olmuşdur. Qadağan zonasının eni böyük olan qallium arsenidə ($GaAs$) f.i.ə. 11% olmuşdur. Kadmium tellur ($CdTe$) da optimal material ola bilər, lakin onun alınması və emalı texnologiyası qallium arsen və silisium kimi hələ kifayət dərəcədə təkmil deyildir.

Fotorezistiv effektə əsaslanan fotoqəbuledicilər – fotomüqavimətlərlə yanaşı olaraq $p-n$ keçidli fotoelementlər də fotodetektorlar kimi geniş tətbiq olunurlar. Fotoelementlər ventill rejimində də istifadə olunurlar. Bu zaman fotodioda əks istiqamətdə elə gerginlik tətbiq olunur ki, işıqlandırıldıqda diod «açılsın», yəni keçirici hala keçsin. Fotoelementlərin belə istifadə olunması avtomatikanın müxtəlif dövrlərində çox əlverişlidir.

İndi isə həcmi fotovoltaiik hadisələrə baxaq. Bunlar aşağıdakılardır: 1) qeyri-bərabər generasiya zamanı foto-e.h.q. yaranması – **Dember foto-e.h.q.**; 2) maqnit sahəsində foto-e.h.q.-nin yaranması – Kikoin-Noskovun FEM-effekti.

Fərz edək ki, yarımkeçirici güclü udulan və elektron – deşik cütü yaradan işıqla işıqlandırılır. Bu zaman yaranan əlavə yüklərin generasiyası qeyri-bərabər olub yarımkeçiricinin dərinliyinə getdikcə Buqer-Lambert qanununa uyğun olaraq eksponensial qanunla azalır. Yükdaşıyıcıların əlavə konsentrasiyasının qradienti nəticəsində onların nümunənin dərinliyinə bipolyar diffuziyası baş verir. Elektronların və deşiklərin diffuziyası eyni istiqamətdə baş verdiyindən elektronların və deşiklərin diffuziya əmsalları eyni olsaydı onların yaratdıqları cərəyanlar bir-birini kompensə edərdi. Lakin elektronların diffuziya əmsalı deşiklərinkindən böyük olduğundan elektroneytrallıq şərti pozulur və udulan işığın yayılma istiqamətdə elektrik sahəsinin yaranmasına səbəb olan həcmi yüklər meydana çıxır. Bu zaman meydana çıxan e.h.q. Dember e.h.q. adlanır. Əgər işıqlandırılan yarımkeçiricidə Dember sahəsi təsiri ilə yaranan və

diffuziya komponentlərindən ibarət olan cərəyanların cəmini sıfıra bərabər götürsək Dember e.h.q. tapa bilərik. Hesablamalar göstərir ki, nümunənin 1 və 2 nöqtələri arasında Dember e.h.q. aşağıdakı kimi ifadə olunur:

$$V_{12}^D = k_0 T (\mu_n - \mu_p) \ln(\sigma_2 / \sigma_1) / [e(\mu_n + \mu_p)]. \quad (7.14.3)$$

Burada σ_1 və σ_2 - nümunənin 1 və 2 nöqtələrində elektrik keçiriciliyidir.

$$\text{Zəif işıqlanma zamanı } \sigma_2 = \sigma_1 + \Delta\sigma = \sigma_1 \left(1 + \frac{\Delta\sigma}{\sigma_1}\right) \approx \sigma_1 \text{ olur. } (7.14.3)$$

ifadəsindəki natural loqarifmi sıraya ayırısaq və sıranın birinci həddi ilə kifayətlənsək alarıq:

$$V_{12}^D \approx k_0 T (\mu_n - \mu_p) \Delta\sigma / [e(\mu_n + \mu_p) \sigma_1].$$

Beləliklə, elektronların və deşiklərin yürüklükləri fərqi nə qədər çox və kristalın ilkin elektrik keçiriciliyi isə nə qədər az olarsa, Dember e.h.q. də bir o qədər çox olar.

Elektrik keçiriciliyinin artması ilə e.h.q.-nin azalması təkcə Dember effekti üçün deyil, həm də termo-e.h.q. və qeyri-bircins yarımkəçiricilərdə baş verən digər həcmi effektlər üçün də xarakterikdir. Bu elektrik neytrallığının pozulması şəraitində axan dreyf cərəyanının $\vec{j}_d = \sigma \vec{E}$ kristalda yaradılan qeyri-bircinsliliklə əlaqədar yaranan diffuziya cərəyanına bərabər olması ilə əlaqədardır. Onda kristalın elektrik keçiriciliyi kiçik olduqca \vec{E} elektrik sahəsi və müvafiq effektin e.h.q. çox olar.

Kikoin-Noskovun FEM effekti də Dember effekti kimi həcmi fotovoltaiq effektdir. Fərz edək ki, Dember effektində olduğu kimi bir səthi işıqlandırılan nümunə kristalda yayılan işığın istiqamətinə perpendikulyar istiqamətdə olan maqnit sahəsində yerləşdirilmişdir. Onda qeyri-bircins işıq generasiyası nəticəsində yaranan və nümunənin sahəsinin təsiri ilə nümunənin işığın yayılma və maqnit sahəsi istiqamətlərinə paralel olan əks üzələrinə tərəf meyl edəcəklər. Bu effekt Holl effektinə oxşardır, lakin Holl effektində maqnit sahəsi xarici elektrik sahəsi təsiri ilə yaranan dreyf sellərini meyl etdirir. Fərq ondadır ki, Holl effektində müxtəlif istiqamətdə dreyf edən elektronlar və deşiklər maqnit sahəsinin təsiri ilə nümunənin eyni bir səthinə meyl edirlər, FEM-effektində isə elektronların və deşiklərin diffuziya selləri eyni istiqamətdədir və maqnit sahəsi onları nümunənin müxtəlif üzələrinə tərəf meyl etdirir.

Dember effektindən fərqli olaraq FEM-effekti elektronların və deşiklərin yürüklükləri fərqi ilə əlaqədar deyil, belə ki, o, elektronlar və deşiklər üçün fərq effekti deyil, cəm effektidir.

FEM-effekti həm məxsusi, həm də aşqar udulması oblastında müşahidə edilə bilər. FEM-effektinin spektral xarakteristikalarını tədqiq etməklə yarımqeçiricinin zona quruluşu və aşqar səviyyələri haqqında məlumat əldə etmək olar. FEM-effekti həm yükdaşıyıcıların həcmi yaşama müddəti, həm də səthi rekombinasiya sürəti ilə təyin olunur. Ona görə də hətta yaşama müddətinin kiçik qiymətlərində belə FEM-effektindən bu parametrləri təyin etmək olar. Təcrübə şəraitindən, səthi rekombinasiya sürəti, yükdaşıyıcıların yaşama müddəti, nümunənin ölçüləri, yükdaşıyıcıları generasiya edən işığın intensivliyi və s. arasındakı münasibətdən asılı olaraq FEM-effektinin e.h.q. və qısa qapanma cərəyanının ifadələri bir-birindən əhəmiyyətli dərəcədə fərqlənirlər. Ona görə də təcrübə nəticələrinin hesabatlarında müxtəlif nəzəri asılılıqlardan istifadə edərkən seçilən nəzəri asılılıqların tətbiq olunma şərtlərinə diqqətlə yanaşmaq lazımdır.

VIII FƏSİL. YARIMKEÇİRİCİLƏRİN ƏSAS PARAMETRLƏRİNİN TƏYİNİ ÜSULLARI

§ 8.1. Yarımkəçiricilərin əsas parametrlərinin təsnifatı

Kristalın xassələrini xarakterizə etmək üsulu tədqiqatçının qarşıya qoyduğu məqsəddən asılı olaraq müəyyənləşdirilir. Elektrik və maqnit sahələri, təzyiq, temperatur qradienti, işıqlanma və digər xarici amillər kimi müxtəlif kənar qüvvələrin təsirinə məruz qalan kristal bu təsirlərin qiymətləri ilə onların kristalda yaratdıqları fiziki proseslərin intersivlikləri arasında münasibətləri müəyyənləşdirən əmsallarla (bunlar parametrlər adlanır) xarakterizə oluna bilər.

Beləliklə, kristalın xassələrini təsvir etmək üçün onda baş verən fiziki effektləri xarakterizə edən parametrlər sistemi müəyyən edilə bilər.

Əgər verilmiş materialın parametrlər sistemi onda baş verə bilən çoxlu sayda fiziki effektləri xarakterizə etmək prinsipi ilə tərtib olunmuşdursa, onda belə sistem özündə həddindən artıq sayda parametrlər cəmləşdirmiş olar və onun həlli, təbiidir ki, böyük çətinlik törədir. Əgər sistem materialın konkret tətbiqi ilə əlaqədar bir neçə ön mühüm parametrlə məhdudlaşdırılırsa belə, bu parametrlərin təcrübi ölçülməsi müxtəlif materiallarda və ya eyni materialdan hazırlanmış müxtəlif nümunələrdə onların qiymətlərinin müxtəlifliyinin nədən asılı olması və bu parametrlərin idarə olunması kimi suallar öz həllini tapmır.

Kristallarda baş verən müxtəlif fiziki hadisələrin nəzəriyyəsi kristal qəfəsin xüsusiyyətləri və ondakı mütəhərrik yükdaşıyıcıları xarakterizə edən bir qrup kristal parametrləri özündə əlaqələndirir. Beləliklə, çoxlu sayda müxtəlif fiziki hadisələrin xüsusiyyət və təbiəti nisbətən bir o qədər də çox olmayan kristal parametrləri arasında kəmiyyət münasibətləri ilə izah oluna bilər. Yükdaşıyıcılar sisteminin əsas xüsusiyyətləri onların enerjilərinin zona quruluşu parametrləri ilə müəyyən olunur ki, bu da öz növbəsində kristallıq quruluş parametrləri, onu təşkil edən atomlar və atomlar arası əlaqələr, fononların enerji spektri və s. amillərdən asılıdır.

Həm kristalda baş verən fiziki hadisələrin parametrlər qrupu, həm də kristalın fiziki parametrlər qrupunda elələrini seçib ayırmaq olar ki, onlar təmiz kristalın xassələrini müəyyən etsin. Bu parametrlər «fundamental parametrlər» adlanır. Kristala daxil edilmiş aşqar atomlarının, eləcə də kristalın məxsusi defektlərinin növü və konsentrasiyasından asılı olan parametrlər «xarakteristik parametrlər»

adlanır. Ona görə də bu iki qrupa uyğun olaraq parametrləri iki sinfə ayırmaq qəbul olunur:

I. Fundamental parametrlər:

a) kristal qəfəs parametrləri: sinqoniya, fəza qrupu və kristal qəfəs sabitləri;

b) enerji zona quruluş parametrləri: valent zonası və keçirici zonaların mütləq ekstremumlarının vəziyyəti, qadağan zonasının eni ΔE (adətən $T=0\text{K}-\Delta E(0)$ -mütləq sıfır və otaq temperaturlarında - $T=300\text{K}-\Delta E|_{T=300\text{K}}$); qadağan zonasının eninin temperatur asılılığı $\Delta E(T)=\Delta E_0+\Delta T$, daha doğrusu ΔE_0 və $d\Delta E/dT$ və təzyiqdən asılılığı $d\Delta E/dP$; elektron və deşiklərin effektiv kütlələri - m_n^* və m_p^* tenzorlarının komponentləri;

c) yükdaşıyıcılar sistemi parametrləri: məxsusi yarımkeçiricidə elektron-deşik cütlərinin konsentrasiyası - n , elektron və deşiklərin dreyf yürüklükləri - μ_n və μ_p ;

d) fiziki hadisələrin parametrləri: məxsusi yarımkeçiricinin xüsusi müqaviməti - ρ , nisbi statik dielektrik nüfuzluğu - ϵ , xüsusi istilikkeçiriciliyi - χ , elastiki sabitlər - C_{ij} , pyezoelektrik sabitlər - d_{ij} , məxsusi udma oblastının sərhəddində fiksə olunmuş dalğa uzunluğuna müvafiq optik udma əmsalı - α , Debay temperaturu - θ_D , sabit təzyiqdə istilik tutumu - C_p və buna bənzər digər parametrlər.

II. Xarakteristik parametrlər:

a) əsas parametrlər: əsas yükdaşıyıcıların növü və konsentrasiyası n_n və p_n , xüsusi müqavimət ρ , qeyri əsas yükdaşıyıcıların diffuziya xətti L_n (p-tip materialda elektronların) və ya L_p (n-tip materialda deşiklərin);

b) əlavə parametrlər: əsas yükdaşıyıcıların yürüklükləri μ_n və μ_p , qeyri əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddəti τ_n və τ_p , leqirə olunmuş və mühüm qalıq aşqarların konsentrasiyası, dislokasiyaların sıxlığı, mütləq diferensial t.e.h.q. - α , termodinamik xarici çıxış işi Φ və bir sıra başqa parametrlər;

c) aşqar halların parametrləri, aşqar halların növü və konsentrasiyası N_d (donor) və N_a (akseptorlar), rekombinasiya və ya bitişmə mərkəzləri N_b , lokal aşqar səviyyələrinin enerjiləri E_d , E_a , E_t (adətən bu kəmiyyətlər ən yuxarı icazəli zonanın ekstremumuna nəzərən verilir - E_c və ya E_v), lokal səviyyələrdə yükdaşıyıcıların tutulma eninin effektiv kəsiyi σ_n və σ_p .

Verilmiş xüsusiyyətlərə və quruluşa malik yarımkeçirici materiallar əldə etmək üçün tədqiqatçılara lazım olan əlavə parametrlər qrupu da vardır ki, bunlara ərimə temperaturu və faza keçidləri, müxtəlif faza keçidlərinə müvafiq istilik miqdarı, aşqarların paylanması və diffuziya əmsalı, maddə buxarının təzyiqi və verilmiş temperaturda onun

komponentləri, eləcə də bir sıra digər mühüm parametrlər. Amma bu parametrlər əsasən materialın fiziki-kimyəvi xüsusiyyətlərini xarakterizə etdiyi üçün bu vəsaitdə onların ölçülmə üsullarına baxılır.

İstər kristalların fundamental, istərsə də xarakterik parametrlərin təyini üsulları müxtəlif fiziki hadisələrdə kinetik əmsalların ölçülməsi və onların temperatur və digər xarici təsirlərdən asılılıqlarının təyininə əsaslanmışdır. Kristalın parametrləri tədqiq olunan hadisənin hər hansı fiziki-riyazi modeli əsasında təcrübənin verdiyi qiymətlərə görə hesablanır. Belə təcrübə parametrlərin qiymətləri onların ölçülmə üsullarından asılı olaraq müxtəlif ola bilər. Əlbəttə, müxtəlif üsullarla ölçmə zamanı meydana çıxan zərərli kənar təsirləri aradan qaldırmaq heç də həmişə mümkün olmur. Amma əsas məsələ yalnız müxtəlif üsullarla ölçmələrdəki nəticələr arasındakı fərqdə deyil, müxtəlif üsullarla ölçmələrdəki parametrlərin fiziki interpretasiyalarının müxtəlif ola bilməsindədir.

Məsələn, termo- e.h.q. ölçməsindən hesablanan sərbəst yükdaşıyıcıların effektiv kütləsi hal sıxlığının effektiv kütləsidir $m_{dn}^* = \sqrt[3]{M^2 m_1 m_2 m_3}$, sərbəst yükdaşıyıcıların optik udulmasından təyin olunan effektiv kütlə isə keçiriciliyin effektiv kütləsidir $m_{ns}^* = [1/3(m_1^{-1} + m_2^{-1} + m_3^{-1})]^{-1}$. Nə bu, nə də digər üsul effektiv kütlə tenzorunun komponentlərini tapmağa imkan vermir və yalnız müxtəlif üsullarla onların ortalaşmış qiymətləri müəyyən oluna bilər. Bu müxtəlif kəmiyyətlərin üst-üstə düşməsi yalnız xüsusi halda bircins keçirici zonada skalyar effektiv kütlə halında mümkündür.

Qadağan zonasının eninin məxsusi udma oblastının kənarı üzrə optik təyini üsulu və onun elektrik keçiriciliyi və Holl əmsalının temperatur asılılıqları bu mühüm kəmiyyət üçün müxtəlif qiymətlər verir, belə ki, ortik üsul qadağan zonasının eninin udma spektrinin ölçüldüyü temperatura uyğun qiymətini təyin etməyə imkan verir, elektrik keçirmənin termik aktivləşməsi və ya Holl əmsalına görə təyini isə baxılan temperatur intervalında deyil, qadağan zonasının eninin $T=0$ -mütləq sıfır temperatura ekstrapolyasiya edilən ΔE_0 qiymətini verir ki, bu da $\Delta E_0(T)$ - funksiyası qeyri xətti olduğundan heç də axtarılan qiymət deyil: $\Delta E_0 \neq \Delta E(0)$.

Yükdaşıyıcıların yürüklüklərinin qalvanomagnit effektlər əsasında ölçülməsi əsas yükdaşıyıcıların Holl və ya dreyf yürüklüyünün qiymətini verir, həmin nümunələrdə əlavə konsentrasiya paketinin dreyfinə görə ölçülən yürüklük isə bipolyar yürüklüyün qiymətini verir ki, bu da aşqar yarı keçiricilərdə praktiki olaraq qeyri əsas yükdaşıyıcıların dreyf yürüklüklərinə bərabərdir.

Fotokeçiricilik və FEM– effektləri əsasında yükdaşıyıcıların yaşama müddətləri üçün alınan nəticələr bir-birindən fərqlənir, buna səbəb bu üsulların əsas və qeyri əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddətlərinin müxtəlif tərzdə ortalaşmasıdır.

Gətirilən misallar müxtəlif üsullarla ölçmələrə görə, yarımkəçirici materialların parametrləri üçün alınan nəticələrin interpretasiyası üçün yaxşı inkişaf etmiş fiziki hadisələr nəzəriyyəsinin nə qədər mühüm rol oynadığını çox qabarıq şəkildə nümayiş etdirir.

Yarımkəçiricilərin məlumat kitablarındakı fundamental parametrlərinin qiymətləri müxtəlif üsullarla alınan ölçmələrin nəticələrinin məlum nəzəri qiymətlərlə müqayisə və analiz etməklə dəqiqləşdirilir. Yarımkəçirici materialların «pasport göstəriciləri» alınan xarakteristik parametrlərinin qiymətləri isə standart təlimatlarla təsdiq olunmuş xüsusi işlənib hazırlanmış ölçmə üsullarına əsasən ölçülüb müəyyənləşdirilir ki, bu təlimatlarda ölçü cihazlarına, nümunələrin hazırlanma texnologiyalarına, ölçmə şərtlərinə və eləcə də alınan nəticələrin işlənmə metodlarına uyğun ciddi tələblər qoyulur.

Bu fəsildə yarımkəçiricilərin mühüm parametrlərinin ən geniş yayılmış ölçmə üsullarına baxılır.

§ 8.2. Yarımkəçiricilərin xüsusi elektrik keçiriciliyinin ölçülməsi

İki zond üsulu. Om qanununa görə cərəyan sıxlığı \vec{j} , xüsusi elektrik keçiriciliyi σ və nümunədə elektrik sahəsinin intensivliyi \vec{E} arasında aşağıdakı kimi riyazi münasibət vardır:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (8.2.1)$$

Praktikada isə nümunədən keçən cərəyan şiddəti I və ondakı gərginlik düşgüsü U -nu təyin etmək daha əlverişlidir. Nümunənin en kəsiyi S , xüsusi müqaviməti ρ olarsa,

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{US}{I\ell} \quad (8.2.2)$$

olar. Burada ℓ - nümunənin gərginlik ölçülən iki nöqtəsi arasındakı məsafədir.

(8.2.2) düsturunu yalnız düzgün həndəsi formalı nümunələr üçün ödənilir və burada əlavə olaraq nümunənin uzunluğu, onun eninə ölçülərinə nisbətən çox-çox böyük olmalıdır (sapabənzər kanallar şərtinin ödənilməsi üçün). Bu ölçmələrdə nümunə uzunsov paralelepiped şəklində yonulub hazırlanır, onun səthi diqqətlə cilalanıb hamarlanır, bütün uzunluq boyu en kəsik eyni, nümunə bircins olmalıdır.

Xüsusi müqavimətin ölçülməsində doğru nəticələr almaq üçün aşağıdakı zərərli təsirləri aradan qaldırmaq lazım gəlir:

a) zond—yarımkeçirici kontaktında qeyri—omik, bağlayıcı yüksək keçid müqaviməti;

b) cərəyan kontaktlarının eyni olmaması, nümunənin qeyri—bircinsliyi üzündən ondan keçən cərəyanın törətdiyi coul istiliyi hesabına qeyri—bircins qızma nəticəsində nümunədə, onun uzunluğu boyu yaranan zərərli termo- e.h.q., belə ki, bu termo- e.h.q.-nin işarəsi nümunədən keçən elektrik cərəyanının istiqamətindən asılı olmur.

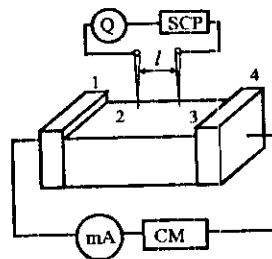
c) kontaktdan cərəyan keçərkən kontakt oblastlarında qeyri—əsas yüklərin injeksiya və ekstraksiyaları, belə ki, onlar nümunənin xüsusi müqavimətinin dəyişməsinə səbəb olurlar.

d) nümunədən cərəyan keçərkən onun qızması nəticəsində müqaviməti dəyişə bilər (analoji hal nümunəni işıqlandıranda da müşahidə oluna bilər).

e) 1 və 4 qeyri omik elektrik kontaktlarındakı Peltje effekti nümunədə əlavə temperatur qradienti yaradır və nəticədə parazit termoelektrik h.q. meydana çıxır, bunun da işarəsi, nümunədəki cərəyanın istiqamətindən asılı olaraq, əksinə də dəyişə bilər.

Bu parazit effektlərin birincisini aradan qaldırmaq üçün ikizond üsulu ilə müqavimətin təyində kompensasiya ölçmə üsulundan istifadə edilərək, iki zond arasındakı gərginlik düzgüsü— U tapılır. Bu zaman ölçü zondlarından cərəyan keçmir (bu şəkildə Q qalvanometri ilə qeyd olunur) və zond-yarımkeçirici kontaktından cərəyan keçmədiyindən onda gərginlik düzgüsü yaranmır, 2 və 3 zondları arasındakı gərginlik düzgüsü isə sabit cərəyan potensimetrinin qütbləri arasındakı əks işarəli potensiallar fərqi ilə kompensə olunur. Parazit termo- e.h.q. isə U_{23} potensiallar fərqini cərəyanın iki əks istiqamətindəki qiymətləri üçün ölçmə aparmaqla, aradan çıxarılır. Bu zaman

$$\begin{cases} U_{23}^{(1)} = U_{nüm} + U_{t.e.h.q} \\ -U_{23}^{(2)} = -U_{nüm} + U_{t.e.h.q} \end{cases}$$



Şəkil. 8.1. İkizond üsulu ilə xüsusi müqaviməti ölçmək üçün prinsipial sxem: 1,4- cərəyan kontaktları; 2,3- ölçmə zondları; CM- cərəyan mənbəyi; SCP- sabit cərəyan potensiyometri

Buradan

$$2U_{\text{nüm}} = U_{23}^{(1)} - (-U_{23}^{(2)}) = U_{23}^{(1)} + U_{23}^{(2)}$$

və nəhayət

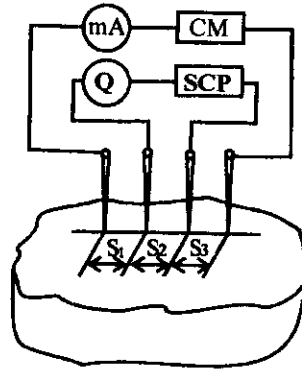
$$U_{\text{nüm}} = \frac{U_{23}^{(1)} + U_{23}^{(2)}}{2}$$

alarıq.

1 və 4 cərəyan kontaktları omik olmalıdır, çünki yalnız o halda kontaktyanı oblastlarda injeksiya və ekstraksiya hadisələri, eləcə də Peltje effekti mövcud olmur, belə ki, bu effekt qeyd olunduğu kimi, əlavə termo- e.h.q.-nin meydana çıxmasına səbəb olur ki, cərəyanın istiqamətini dəyişməklə də ondan yaxa qurtarmaq mümkün olmur, çünki hər ikisi işarələrini eyni zamanda dəyişir. Cərəyan şiddəti kifayət qədər kiçik (milliamperlərin hissələri tərtibində) seçilir ki, nümunə qızmasın. Potensiometrlərin tətbiqi ilə kompensasiya üsulu ilə ölçmə müəyyən praktiki çətinlik törətdiyindən bu ölçmələri elektron voltmetrləri ilə ölçmə ilə əvəz etmək olar, onların giriş müqavimətləri çox böyük olduğundan, belə ölçmələrdə zondlardan keçən cərəyan şiddəti sıfır – qalvanometrın həssaslığı tərtibində olur ki, bu da tələb olunan dəqiqliyi ödəyir.

İki zond üsulu ilə xüsusi müqavimətin təyininin əsas çatışmazlığı nümunənin dəqiq həndəsi formada hazırlanması və nümunənin oturacaqlarındakı kontaktların omik xarakterdə olmasına qoyulan ciddi tələblərdir.

Dörd zond üsulu. Daha universal və ona görə də geniş yayılmış üsul xüsusi müqavimətin dörd zond üsulu ilə ölçülməsidir. Bu üsulda nümunənin düzgün həndəsi formaya malik olması tələb olunmur: bunun üçün nümunənin heç olmasa bir üzünün müstəvi səth olması kifayətdir, və səthə qoyulan dörd ölçü zondlarından ikisi cərəyan kontaktı, qalan ikisi isə nümunədəki gərginlik düşgüsünü ölçmək üçündür. Əksər hallarda düz xətt üzrə bir-birindən bərabər məsafələrdə yerləşən dörd zondlu ekvidistant başlıqlardan istifadə olunur. Belə başlıqların nümunələrə qoşulması şəkil 8.2-də



Şəkil 8.2. Dördzond üsulu ilə xüsusi müqaviməti ölçmək üçün prinsipial sxem

göstərilmişdir. İki zond üsulunda olduğu kimi kontakt müqavimətlərində meydana çıxan əlavələrin aradan qaldırılması üçün ölçü zondları

arasındaki gerginlik düzgüsü U_{23} kompensasiya üsulu ilə ölçülür. Dörd zond üsulunda xüsusi müqavimətin hesablanması düsturu aşağıdakı mühakimələrdən təyin oluna bilər.

Om qanununu diferensial şəkildə

$$\vec{E} = \vec{j}\rho \quad (8.2.3)$$

kimi yazıla bilər. Zondun nümunənin müstəvi səthinə toxunan hissəsində potensialın paylanması sferik simmetrik qəbul edilərək, aşağıdakı münasibətləri yazıla bilər:

$$E(r) = -\frac{\partial U}{\partial r} \quad (8.2.4)$$

$$j(r) = \frac{I}{2\pi r^2}$$

burada r - nümunənin hər hansı nöqtəsindən I cərəyan şiddəti keçən zondla kontakt nöqtəsinə qədər olan məsafədir.

(8.2.4) ifadəsini (8.2.3)-də nəzərə alaraq inteqrallasaq:

$$-\frac{\partial U}{\partial r} = \frac{I}{2\pi r^2} \rho$$

$$\int_0^U dU = -\int_0^r \frac{I\rho}{2\pi r^2} dr = \frac{I\rho}{2\pi} \int_0^r \left(-\frac{1}{r^2}\right) dr,$$

$$U(r) = \frac{I\rho}{2\pi r}$$

alırıq. I cərəyanlı 1, $-I$ cərəyalı 4 kontaktlarının 2 və 3 nöqtələrində yaratdıqları potensialları toplamaqla

$$U_{23} = \frac{I\rho}{2\pi} \left(\frac{1}{S_1} - \frac{1}{S_2 + S_3} - \frac{1}{S_1 + S_2} + \frac{1}{S_3} \right)$$

alırıq.

$$\frac{1}{S_{ekv}} = \frac{1}{S_1} - \frac{1}{S_2 + S_3} - \frac{1}{S_1 + S_2} + \frac{1}{S_3}$$

əvəzləməsini etsək, ekvidistant ölçmə başlığı üçün $S_1 = S_2 = S_3 = S$ olduğundan $S_{ekv} = S$ və nümunənin xüsusi müqavimətini hesablamaq üçün

$$\rho = \frac{2\pi S U_{23}}{I_{14}} \quad (8.2.5)$$

düsturunu alırıq.

Bir müstəvi səthə malik yarımsonsuz nümunə üçün alınmış bu düstur, zondlardan nümunənin yan və ya aşağı sərhəddinə kimi olan məsafələr zondlar arasındakı məsafədən 3 dəfə artıq olan hallarda böyük dəqiqliklə (xəta $\leq 2\%$) ödənilir. Nümunənin ölçüləri kiçik olan halda onun hündəsi forması və ölçü zondları arasındakı məsafədən asılı olaraq ölçmə prosesində əlavə düzəlişlər etmək lazım gəlir.

Altıqlar üzərində laylar və ya təbəqələr şəklində hazırlanmış nümunələr üçün potensialın sferik-simmetrik paylanma şərti ödənilmədiyindən, (8.2.5) düsturu ödənilmir. Əgər kifayət qədər böyük təbəqənin və ya layın qalınlığı ω ölçü başlığının S parametrlərindən çox-çox kiçik olarsa $\left(\frac{\omega}{S} \ll 1\right)$, onda potensialın nümunədə paylanması sferik deyil, silindrik xarakterdə olur və r radiuslu ω qalınlıqlı bircins silindrin yan səthindən keçən cərəyan sıxlığı

$$j(r) = \frac{1}{2\pi r \omega},$$

zonddan r məsafədə isə $U(r)$ potensialı

$$U(r) = -\frac{I\rho \ln r}{2\pi\omega} = \frac{I\rho}{2\pi\omega \ln r}$$

kimi hesablanı bilər.

Ekvidistant dördzondlu başlığın bir düz xətt boyunca yerləşən 2 və 3 zondları arasındakı U_{23} potensiallar fərqini hesablayaraq

$$U_{23} = -\frac{I_{14}\rho \ln 2}{\pi\omega}$$

alırıq ki, buradan da təbəqənin xüsusi müqaviməti aşağıdakı düsturla hesablanı bilər:

$$\rho = \frac{U_{23}\omega\pi}{I_{14} \ln 2} \approx 4,53 \frac{\omega U_{23}}{I_{14}} \quad (8.2.6)$$

əgər təbəqənin qalınlığı dördzondlu ölçü başlığının parametri s -dən çox-çox kiçik, onun xətti ölçüləri isə s -dən çox-çox böyük olarsa, bu düstur doğrudur. bu şərt ödənilməzsə, $\frac{\omega}{S}$ nisbətindən asılı olan düzəliş əmsalı daxil etməklə bu düsturu uyğun məqsədlər üçün istifadə etmək olar.

§8.3. Düzgün həndəsi formalı yarımkeçirici nümunələrin elektrofiziki parametrlərinin ölçülməsi

Yarımkeçiricilərin əsas xarakterik parametrləri olan qadağan olunmuş zonanın eninin, sərbəst yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının, yürüklüyünün və effektiv kütlələrinin təcrübi təyini müxtəlif üsullarla həyata keçirilir. Bu baxımdan məlum üsulların ətrafı şərhini vermədən yalnız elektrik keçiriciliyini, Holl və termo-e.h.q əmsallarını eyni zamanda və eyni nümunədə, geniş temperatur oblastında ölçməyə imkan verən tutqacı nəzərdən keçirək (şəkil 8.3). Burada 1 tutqacın daxili 2 şlifli və 3 vakuum kranlı xarici hissəsi, 5 nümunənin yerləşdiyi hissəni xarici

köynükle birleşdiren xarici şlif, 6-zondların bir yere toplandığı kvars boru, 4 şliflə tutqacı birleşdiren kvars borudur. Nümunenin tutqacı qalın divarlı borudan ibarətdir (şəkil 8.4). Bu boruda 16 nümunəsinin bərkidilməsi üçün pəncərə vardır. Nümunə 11 tərənmez və 15 tərənən kvars blokları arasında bərkidilir. Tərənən blok 12 vtulkasından keçərək 13 yayı vasitəsilə 14 fiksatora birləşir. Volfram zondlar, diametri

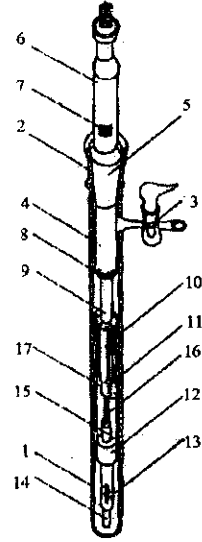
$(2-3) \cdot 10^{-4}$ m ölçü termocütleri və polad yay istisna olmaqla qurğunun qalan bütün hissəsi ərınmiş kvarsdan hazırlanır. Bu qurğu mürekkəb

yarımkeçiricilərin elektrikkeçiriciliyini, Holl effektini və termoelektrik hərəkət qüvvəsini ölçmək üçün tətbiq olunmur. Ölçmələr 0,01 Pa vakuumda aparılır. Nümunələr orta ölçüləri $(3 \times 4 \times 12) \times 10^{-9} \text{m}^3$ olan düzbucaqlı paralelepiped şəklində hazırlanır.

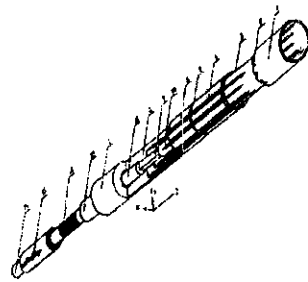
Nümunələrin uclarındaki temperatur xromel-alümel termocütleri vasitəsilə ölçülür. Cərəyan ötürücü naqillər kimi termocütün alümel və ya xromel qollarından istifadə edilir. Onlar həmçinin termo-e.h.q.-nin ölçül

məsi zamanı elektrod rolunu oynayır. Beləliklə, nümunə iki cərəyan və üç potensial kontakta malik olur. Kiçik müqavimətli elektrik kontaktının yaradılması üçün nümunələrin ucları

In-Ga evtektikası ilə örtülür və etibarlı omik kontaktların yaradılması üçün potensial zondlar nümunə üzərinə kondensatorlar batareyasının elektrik boşalmasının köməyi ilə qaynaq olunur. Ölçmələr 300-1100K temperatur intervalında aparılır. Elektrik parametrlərinin temperatur aşılıhqlarının yüksək temperaturlarda ölçülməsi zamanı kvars boru üzərinə silindrik formada hazırlanmış xüsusi soba geyindirilir.



Şəkil 8.3. Vakuum tutqacının ümumi görünüşü



Şəkil 8.4. Kvars tutqacın tam quruluşu

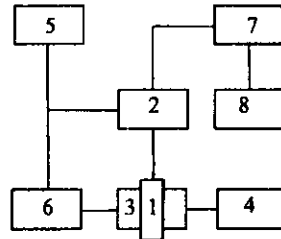
Zondların qeyri-simmetrik yerləşməsi ilə əlaqədar olaraq meydana çıxan parazit e.h.q.-ni və xətaləri aradan qaldırmaq üçün potensial zondlardakı gərginlik düşgüsü nümunədən keçən cərəyanın iki əks istiqaməti üçün, Holl e.h.q.-si isə elektrik cərəyanının və maqnit sahəsinin iki istiqaməti üçün ölçülür. Ölçmələr sabit cərəyanda şəkil 8.5-də göstərilən blok-sxemi üzrə kompensasiya üsulu ilə və ya rəqəmli voltmetrlə aparılır.

Yarımkeçiricilərin elektrofiziki parametrlərini ölçmək üçün qurğunun prinsipial sxemi şəkil 8.6-da verilmişdir. Bütün ölçmələr zəif elektrik və maqnit sahələrində aparılır. σ və R -in ölçülməsi zamanı bütün mümkün olan xətalər nəzərə alınmışdır.

Adətən üç qrup xətanı fərqləndirirlər. Instrumental, metodik və ölçülən obyektin qeyri-idealığı ilə əlaqədar olan xətalər. Birinci xəta qrupuna ölçmə sxeminin xətaləri

daxildir ki, onları da yüksək həssaslıqlı ölçmə cihazlardan istifadə etməklə kiçiltmək olar. İkinci qrup xətalər temperatur ölçmələri zamanı yaranır və tədqiqat metodikasının qeyri mükəmməliyi ilə əlaqədardır. Belə xətalara misal olaraq termocütlərin qeyri mükəmməliyi ilə əlaqədar meydana çıxan xətaləri göstərmək olar ki, bu da özünü nümunənin temperaturunun termocütün göstərişləri ilə üst-üstə düşməməsində özünü göstərir. Bu cür xətalərin aradan qaldırılması yolları kimi müxtəlif temperatur intervalları üçün tətbiq olunan termocütlərin optimal seçilməsi, termocüt və kristal arasında yaxşı istilik kontaktının yaradılması, termocütün dəqiq dərəcələnməsi və onların periodik yoxlanılması və s. göstərmək olar. Bu tip xətalara, həmçinin, həndəsi xarakter daşıyan xətaləri: - kontaktların yaradılma yollarını və nümunələrin qeyri bircinsliyini göstərmək olar. Nümunənin həndəsi ölçülərinin dəqiq cihazların köməyi ilə sistematik təyini bu tip xətalərin kiçildilməsinə gətirir.

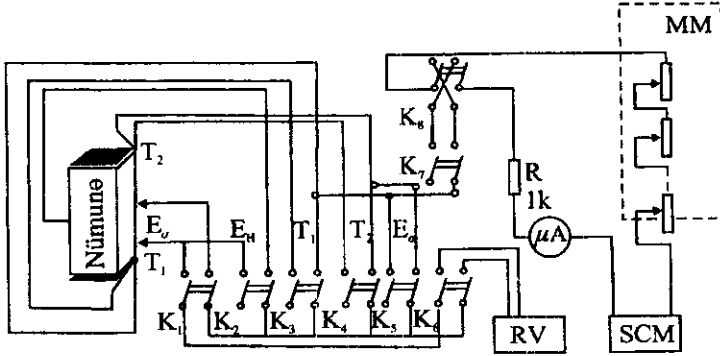
Tədqiq olunan kristalların qeyri-idealığı ilə əlaqədar olan xətalər, nümunənin qeyri-bircinsliyi nəticəsində ölçmələr prosesində nəzərə çarpacaq rol oynayırlar. Ölçmə zamanı belə xətalərin azaldılmasının yeganə yolu mümkün qədər yüksək dərəcəli bircins nümunələrdən



Şək. 3.9. Kinetik əmsalların temperatur asılılıqları ölçülən qurğunun blok-sxemi

- 1- tutqac
- 2- siqnalın idarəedici və əlaqələndirici blok,
- 3- sabit maqnit
- 4- temperaturun əlaqə bloku
- 5- cərəyanın əlaqə bloku
- 6- maqnitin ədədə bloku
- 7- rəqəmli voltmetr
- 8- rəqəmli çapedicisi qurğu

istifadə edilməsidir. Nümunədə cərəyanın qiymətini təyin edərkən R-321, R-310 tipli (dəqiqlik 0,01) etalon müqavimətlərdən istifadə olunur və belə ölçmələrdə cərəyan şiddəti mümkün qədər kiçik seçilir. Nümunənin xətti ölçüləri və zondlar arasındakı məsafə dəqiqliyi $5 \cdot 10^{-5}$ m olan MİR-12 mikroskopu vasitəsilə ölçülür və bu zaman xəta 0,1-0,2% olur.



Şek. 8.6. Yarımkəçiricilərin elektrofiziki parametrlərini ölçmək üçün prinsipial sxem:

RV- rəqəmli voltmetr; SCM-sabit cərəyan mənbəyi;
MM- müqavimətlər mağazası.

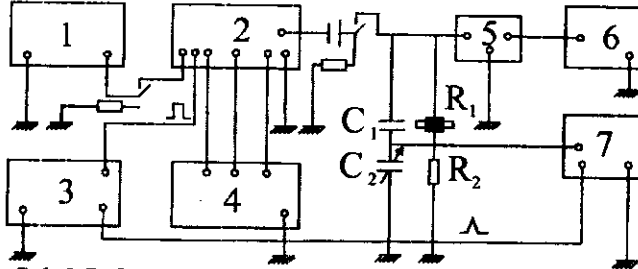
Cərəyanın nümunənin qalınlığı və eləcə də nümunədə gərginliyin ölçülməsi zamanı nisbi xəta hesablanmış və 5% olduğu müəyyən edilmişdir. σ və R-in eyni zamanda ölçülməsi halında yürüklük (σ) hesablanmışdır. σ -nün hesablanması zamanı xətanın qiyməti σ və R-in xətlərinin cəminə bərabər olub 10% təşkil edir. Aparılan işin nəticəsində ölçmələrin qiymətləndirilməsi aşağıdakı təcrübələrlə həyata keçirilmişdir.

- 1) Ölçmədən sonra nümunə tutqacda saxlanılaraq müəyyən müddətdən sonra ölçmə yenidən təkrar olunur.
- 2) Ölçmədən sonra nümunə tutqacdən çıxarılır, kontaktlar yenidən bərpa olunur və ölçmə təkrar edilir.
- 3) Bir neçə nümunə üzərində aparılan ölçmələr göstərdi ki, ölçmənin nəticəsi səmərəli olub, maksimal kənara çıxma ölçü xətası hüdudlarında olur.

§ 8.4. Yarımkəçiricilərdə qüvvətli sahə effektlərinin tədqiqi üsulu

Qüvvətli elektrik sahələrində yarımkəçiricilərin elektrik keçiriciliyinin tədqiqi adətən impuls rejimində həyata keçirilir. İmpuls

rejimi sabit gərginlikli cərəyan mənbələrinə nisbətən yüzlərlə və hətta minlərlə dəfə daha qüvvətli impuls generasiya etməyə imkan verir. Bu amil aşağı omlu nümunələrin belə elektrik keçiriciliyini qüvvətli elektrik sahələrində tədqiq etməyə imkan verir.



Şek.8.7. Qüvvətli elektrik sahələrində yarımkəçiricilərin elektrik keçiriciliyini ölçmək üçün qurğunun blok-sxemi:

- 1- Yüksəlt voltlu gərginlik düzləndiricisi;
- 2- Yüksək voltlu impuls generatoru;
- 3- Düzbucaqlı impuls generatoru;
- 4- Aşağı voltlu düzləndirici;
- 5- Gərginlik ölçən D6-1;
- 6- B4-2 tipli impuls voltmetri;
- 7- C1-54 tipli osiloqraf

Qeyd etmək lazımdır ki, impuls rejiminin tətbiqi yarımkəçiricilərin elektrik keçiriciliyinin zəif sahələrdə tədqiqi zamanı da böyük əhəmiyyət kəsb edir, belə ki, impuls rejimində ölçmələr zamanı nümunələrdə polyarizasiya baş vermir, kontaktyanı müqavimət və həcmi yüklərin yaranması istisna olunur.

Tədqiq olunan yarımkəçirici nümunənin xüsusi müqavimətindən asılı olaraq, nümunədən keçən cərəyanın Coul-Lens qanununa görə nümunəni qızdırması ilə bağlı istilik effektlərini aradan qaldırmaq üçün impulsun parametrlərini (formasını, tezliyi, müddəti, impulsun cəbhəsi və s.) hər bir nümunə üçün müvafiq qaydada seçmək lazım gəlir.

Şəkil 8.7.-də yarımkəçiricilərin elektrik keçiriciliyinin qüvvətli elektrik sahələrində tədqiqi üçün istifadə olunan qurğunun blok-sxemi verilmişdir. Qısa şəkildə blok sxemin iş prinsipi və ölçmə üsulunu təsvir edək.

Düzbucaqlı impuls generatoru Г5-15 C1-54 ossilloqrafını gözləmə rejimində və müəyyən keçinmə ilə yüksək voltlu impuls gücləndiricinin işə düşməsinə təmin edir. Qurğu uyğun cərəyan mənbələri vasitəsilə

qidalanı. Çevirici açar vasitəsi ilə yığıcı tutumun boşaldılması və nümunəyə gərginlik verilməsi təmin edilir.

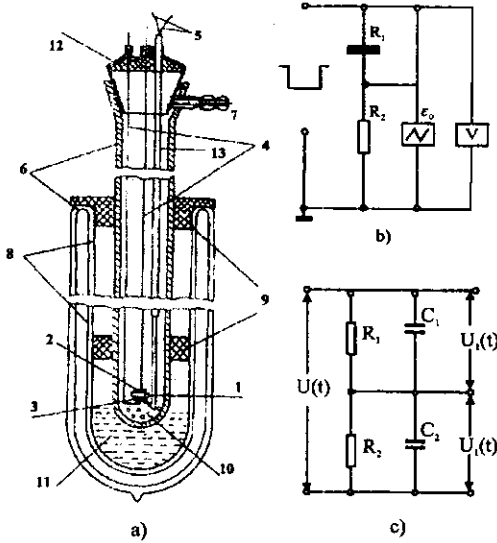
C1-54 (və ya hər hansı digər müvafiq ossilloqraf) ölçmələrdə adətən iki əsas funksiyanı yerinə yetirir. Birinci, o, impulsun formasını nəzarətdə saxlamağa və onun uzunluğunu (davam etmə müddətini) ölçməyə imkan verir. İkincisi, ossilloqrafın köməyi ilə impulsun amplitudu ölçülür. Beləliklə, məlum (etalon) müqavimətdə düşən gərginlik ossilloqrafla, məlum müqavimət və nümunədəki ümumi gərginlik düşgüsü isə B4-2 tip voltmetrlə ölçülür, onların fərqi isə, aydındır ki, nümunədəki gərginlik düşgüsünü verir. Ossilloqraf əvvəlcədən dərəcələnilir. Məlum müvazimət ossilloqrafın giriş müqavimətindən çox-çox kiçikdir və ona görə də ondakı gərginlik düşgüsü böyük dəqiqliklə ölçülə bilər.

Qüvvətli elektrik sahələrində yarımqeçiricilərin elektrik keçiriciliyinin ölçülmə qurğusunun prinsipial sxemi şəkil 8.8, b-də, bu qurğunun ekvivalent sxemi isə 8.8, c-də verilmişdir.

Məlumdur ki, yarımqeçiricilərin elektrik keçiriciliyi temperatur və xarici elektrik sahəsindən güclü asılıdır. Temperatur aşağı olduqca, qeyd etdiyimiz kimi, elektrik keçiriciliyinin xarici sahə intensivliyindən asılılığı özünü daha aydın biruzə verir. Ona görə də qüvvətli elektrik sahələrində elektrik keçiriciliyinin tədqiqi mümkün qədər geniş temperatur öblastında həyata keçirilir. Xüsusi halda, otaq temperaturundan maye azot temperaturuna qədər (77-300K) intervalda ölçmələr xüsusi konstruksiya edilmiş tutqacda aparılır. Bu tutqac şəkil 8.8.-də göstərilən termostat daxilində xüsusi şüşə cihazda yerləşdirilir. Məhz bu qurğunun köməyi ilə aşağıda göstərilən qaydada müxtəlif temperaturları əldə etməklə qüvvətli elektrik sahələrində elektrik keçiriciliyinin sahə asılılığını müəyyən etmək mümkün olur.

Şəkil 8.8,a-dan görüldüyü kimi üzərində nümunə otuzdurulmuş şüşə cihaz Düar qabının divarlarına kip otuzdurulmuş penoplast probkalaradakı dar pəncərələrdən keçərək maye azota daxil olur. Uzunluğu 50 sm olan Düar qabına, onun həcmnin dördüdə biri qədər maye azot tökülür. Penoplast probkalar maye azotun buxarlanma sürətini lazımi səviyyəyə kimi azaltmağa imkan verir. Şüşə cihazı bu düar qabına tədricən daxil etməklə tədqiq olunan nümunədə temperaturu ~300 K-dən maye azot temperaturuna qədər endirmək və hər bir aralıq qiymətə uyğun elektrik keçiriciliyinin sahə asılılığını ölçmək mümkün olur. Sonra içərisində nümunə bərkidilmiş şüşə cihazı tədricən Düar qabdan çıxararaq ölçmələri azot temperaturundan ~300 K-nə qədər temperaturun artması istiqamətində təkrar aparmaq olar. Hər bir ölçmə üçün temperaturun qərarlaşmasına ~30-40 dəqiqə kifayət edir. Elektrik keçiriciliyinin sahə asılılığının hər bir temperaturda ölçülməsi ~10 dəqiqə ərzində mümkün

olur, ~30 dəqiqə ərzində isə ölçməyə uyğun qərarlaşmış temperatur 0,5 K dəqiqliyi ilə dəyişməz qalır. Penoplast probkaların sayını 3-4 ədədə çatdırıb, nümunənin temperatur sabitliyini bir saata qədər artırmaq olur.



Şək.8.8. Qüvvətli elektrik sahələrində yarımqeçiricilərin elektrik keçiriciliyi ölçülən kriostat (a) və ölçmə sxemi (b,c)

Nümunənin temperaturu verilmiş temperatur oblastında mis – konstantan termocütü vasitəsi ilə ölçülür, bu zaman termocütün lehimi birbaşa nümunəyə sıxılır. Termo- e.h.q. rəqəmli voltmetr və ya ПП-63 potensiometri kimi müvafiq cihazlarla ölçülür.

İçərisində nümunəli tutqac yerləşdirilmiş şüşə cihazda neytral atmosfer yaradılır ki, havanın nəmliyi ölçmələrin nəticəsinə təsir etməsin. Bundan əlavə, nəmliyi udma məqsədi ilə cihazda fosfor anhidridli tozu da yerləşdirilir. Yarımqeçiricilərin elektrik keçiriciliyi işıq qarşı da həssas olduğundan, ölçmə qurğusu işıqdan diqqətlə ekranlanır. Mümkün amillərin necə alınması ilə aparılan araşdırmalar ölçmə xətasının $\pm 10\%$ tərtibində olduğunu göstərir.

Nümunəyə elektrik kontaktlarının qoyulması mühüm əhəmiyyət kəsb etməklə yanaşı, kifayət qədər çətinlik törədir. Bizim ölçmələrdə bu məqsədlə aşağıdakı kimi sadə və universal bir üsul işlənib hazırlanmışdır. Onun mahiyyəti aşağıdakı kimidir: monokristallik nümunə laylı təbəqələrə malikdirsə, onu qalınlığı ~50 mikron olan nazik təbəqəyə

ayırtıb, onun üzərinə БФ-2 yapışqanının (və ya hər hansı digər analoji xassəyə malik yapışqanı) spirtdə həll olunmuş nazik təbəqəsi çəkilir və ona qurumağa imkan vermədən isti (az güclü) lehimləyicinin köməyi ilə nöqtəvi indium kontaktı vurulur. Kontakt zəndu olaraq diametri ~0,1 mm olan mis naqillərdən istifadə edilir.

Aparılan ölçmələr göstərir ki, bu qayda ilə əldə edilmiş kontaktların volt-ampər xarakteristikaları ölçmədə istifadə olunan cərəyanlar diapazonunda xəttidir və onların mexaniki möhkəmliyi temperaturun azalması, və sonra yenidən, əksinə artması istiqamətində ölçmələri bir dəfəyə, kontaktları yenidən bərpa etmədən, aparmağa imkan verir.

Qeyd etmək lazımdır ki, indium aşağı temperaturda əridiyindən və çox az gücə malik lehimləyicidən istifadə etməklə kontakt yaratma prosesi çox kiçik zaman fasiləsində həyata keçirilir, bu da nümunənin kəskin qızması və deformasiya baş verməsi imkanlarını aradan qaldırır.

§8.5. Bərk cisimlərin istidən genişlənmə və izotermik sıxılma əmsallarını ölçmə üsulu

Bərk cisimlərin istidən genişlənməsi kristal qəfəsdə atomların qarşılıqlı təsirinin yekun potensialının anharmonikliyinə nəticəsi kimi meydana çıxır. Bərk cisimlərin istidən genişlənməsinin elementar nəzəriyyəsinə qurmaq üçün adətən qarşılıqlı təsirdə olan iki atomdan ibarət sadə modelə baxılır. $T=0$ K temperaturda atomların tarazlıq vəziyyətindən x qədər yerdəyişməsi zamanı potensial enerjini

$$U(x) = U_0 + \frac{1}{2}cx^2 - \frac{1}{3}gx^3 = U_0 + \Delta U \quad (8.5.1)$$

kimi ifadə etmək olar. Burada ikinci toplananda

$$\Delta U = \frac{1}{2}cx^2 - \frac{1}{3}gx^3 \quad (8.5.2)$$

C- kvazielastiki əlaqə əmsalı, g- anharmoniklik əmsalıdır, U_0 - tarazlıq halında atomların qarşılıqlı təsirinin potensial enerjisidir.

Bu ifadələrdən istifadə edərək iki atom arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvəsini

$$F = -\frac{d(\Delta U)}{dx} = -cx + gx^2 \quad (8.5.3)$$

kimi təsvir edə bilərik. Burada ikinci hədd əlavə kvadratik qüvvə olub, təqribən assimetrikliyi nəzərə almağa imkan verir və birinci yaxınlaşmada anharmoniklik əmsalı g ilə mütənasibdir. Bu qüvvə müsbət olub, $x > 0$

olduqda əsas qüvvənin əksinə yönəlir və atomu geriyyə çəkməyə, daha doğrusu, atomlar arasındakı cazibə qüvvəsini azaltmağa çalışır; $x < 0$ olduqda isə bu qüvvə əlavə itələmə yaradır. Beləliklə, itələmə qüvvələri atomların bir-birinə yaxınlaşması anında itələnmə qüvvələri, onları uzaqlaşdıqca yaranan cazibə qüvvələrinə nisbətən daha tez artır.

Rəqs edən atoma təsir edən qüvvənin orta qiyməti sifra bərabərdir:

$$\bar{F} = -c\bar{x} + g\bar{x}^2 = 0,$$

bu zaman tarazlıq vəziyyətindən sürüşmənin orta qiyməti

$$\bar{x} = \frac{g\bar{x}^2}{c} > 0 \quad (8.5.4)$$

Kvadratik düzəlişi nəzərə almasaq, $g=0$ və orta sürüşmə də həmçinin sifra çevrilir. Amma assimetriyanı nəzərə alsaq, bu ifadə müsbət olur. İkinci tərtib yaxınlaşma dəqiqliyi ilə \bar{x}^2 kəmiyyətini onun harmonik yaxınlaşmadakı qiyməti ilə əvəz etmək olar. Bu halda istilik rəqslərinin orta potensial enerjiləri- $\frac{1}{2}c\bar{x}^2$ istilik hərəkətinin orta $\frac{1}{2}kT$ enerjisinə bərabər qəbul etmək olar, beləliklə,

$$\bar{x} = \frac{g\bar{x}^2}{c} = \frac{gkT}{c^2} \quad (8.5.5)$$

yazmaq olar, burada aydındır ki, k -Bolsman sabiti, T - isə mütləq temperaturdur.

İkiatomlu model üçün nisbi genişlənmə tarazlıq vəziyyətindən orta yerdəyişmənin - \bar{x} , atomlar arasındakı başlanğıc məsafəyə nisbəti kimi təyin oluna bilər:

$$\frac{\bar{x}}{r_0} = \frac{gkT}{r_0c^2} = \alpha T, \quad \alpha = \frac{gk}{r_0c^2} \quad (8.5.6)$$

Burada α - istidən genişlənmənin xətti əmsalı (İGƏ) adlanır. Aldığımız son ifadədən görüldüyü kimi İGƏ g -anharmoniklik əmsalı ilə düz mütənasibdir və $g=0$ olduqda sifra bərabər olur.

İstidən genişlənmə bərk cismin halını xarakterizə edən parametrlərlə - temperatur, kristallik qəfəsdə atomlar arasındakı kimyəvi əlaqə, zona quruluşu, kristaldakı defektlər, onların növü, yerləşməsi, konsentrasiyası, kristaldakı struktur və maqnit çevrilmələri və sairə kimi xassələrlə sıx əlaqədardır. Bütün bu parametrlər istidən genişlənməyə öz paylarını verirlər. Məhz bu səbəbdən hər hansı materialın istidən genişlənmə

əmsalının temperatur və tərkib asılılığını tədqiq etməklə yuxarıda sadalanan keyfiyyətlər haqqında uyğun mülahizələr aparmaq olar. Məsələn, adi metallarda İGƏ aşağıdakı münasibətlə ifadə oluna bilər:

$$\alpha = \alpha_e + \alpha_L \quad (8.5.7)$$

burada α_e - uyğun olaraq İGƏ-nin elektron, α_L - sə qəfəs toplananlarıdır. Adətən $T > 0,1\theta$ - temperatur oblastlarında (θ - Debay temperaturudur) metallarda istidən genişlənmədə əsas rol qəfəs toplananı oynayır. Aşağı temperaturlarda ($T < 0,1\theta$) metallar üçün istidən genişlənmə əmsalının elektron toplananı qəfəs toplananı ilə eyni tərtibli, $T > 0K$ - mütləq sıfırın yaxın ətrafında isə daha üstün olur.

Yarımkəçiricilərdə İGƏ-nin kəmiyyəti və temperatur asılılığı bir sıra amillərdən asılıdır. Bir çox müəlliflərinin işlərində qeyd olunduğu kimi kovalent əlaqə üstünlük təşkil edən yarımkəçirici materiallara elektrik aktiv aşqarlarının daxil edilməsi bu əlaqələri zəiflədir və nəticədə istidən genişlənmə əmsalının artmasına gətirib çıxarır.

S.N.Novikova göstərmişdir ki, aşqar daxil edildikdə meydana çıxan kiçik əlaqəni F_0 sərbəst enerjiyə olan artım kimi hesablamaqla və istidən genişlənmə əmsalının məlum

$$\alpha = \frac{\partial^2 F_0}{\partial P_0 T} \quad (8.5.8)$$

asılılığından istifadə etməklə, ona edilən düzəlişi

$$|\delta\alpha| \sim n \frac{\delta\Delta E}{T} \quad (8.5.9)$$

şəklində ifadə etmək olar. Burada n - aşqarların konsentrasiyası, ΔE isə aşqar səviyyələri keçirici zonanın dibi arasındakı enerji fərqi.

Yarımkəçiricilərdə istidən genişlənmə həmçinin qadağan zonasının eni və yükdaşıyıcıların effektiv kütlələrinin dəyişməsinə gətirib çıxarır. İstidən göstərilir ki, qadağan zonasının eninin temperaturdan asılı olaraq

dəyişməsi $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)$ kristalın istidən genişlənməsi və yükdaşıyıcıların qəfəs ionlarının rəqsləri ilə qarşılıqlı təsirinə nəticəsi kimi meydana çıxır.

$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)$ - törəməsinə aşağıdakı cəm şəklində ifadə etmək olar:

$$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_o + \left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_v + \dots + , \quad (8.5.10)$$

Burada $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_o$ - istidən genişlənmə hesabına rəqs etməyən qəfəsdə E_g -

qadağan zonasının eninin temperatur dəyişməsi, $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_v$ isə kristalın

həcmnin sabit qiymətində yükdaşıyıcıların kristalilik istilik rəqsləri ilə qarşılıqlı təsiri hesabına E_g - qadağan zonasının temperaturdan asılı olaraq dəyişməsidir. Bu ifadədə birinci toplanan

$$\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_o = \frac{3\alpha}{\chi_T} \left(\frac{\partial E_g}{\partial P}\right)_T, \quad (8.5.11)$$

kimi təyin etmək olar. Burada χ_T - kristalilik izotermik sıxılma əmsalı, α isə məlum olduğu kimi istidən genişlənmə əmsalıdır. Uyğun hesablamalar göstərir ki, qadağan zonasını temperaturdan asılı olaraq dəyişməsinin

təqribən yarısı qəfəsin istidən genişlənməsi - $\left(\frac{\partial \partial E_g}{\partial T}\right)_o$, digər $\left(\frac{\partial E_g}{\partial T}\right)_o$ v-

yarısı isə yükdaşıyıcıların fononlarla qarşılıqlı təsiri hesabına baş verir.

Yükdaşıyıcıların effektiv kütlələrinin temperatur asılılığı da qadağan zonasının temperatur asılılığı kimi eyni iki amillə əlaqədardır. Yükdaşıyıcıların dalğa funksiyalarına müstəvi dalğalar kimi baxaraq X.Erenrayx göstərmişdir ki, yükdaşıyıcıların kristal qəfəsdə fononlarla qarşılıqlı təsiri effektiv kütlənin temperatur dəyişməsinə çox xüzi təsir edir. buradan alınır ki, effektiv kütlənin temperatur asılılığı demək olar ki, bütövlükdə kristal qəfəsin istidən genişlənməsi ilə əlaqədardır və əlavə olaraq onu da qeyd etmək yerinə düşərdi ki, effektiv kütlə qadağan zonası ilə bir-birindən ayrılmış zonaların qarşılıqlı təsirinin nəticəsi kimi təzahür etdiyindən, onun temperaturdan asılı olaraq dəyişməsinə qəfəs istidən genişlənməsinin yaratdığı qadağan zonasının nisbi dəyişməsinə bərabər qəbul etmək olar.

Məlum olduğu kimi, ion rabitəsi üstünlük təşkil edən kristallarda potensial enerjinin atomlar arası məsafədən asılılığı kəskin assimetrik olduğundan, kristal qəfəs rəqslərindəki anharmoniklik də daha böyük olur.

Əksinə, kristal qəfəsdə kovalent rabitə üstünlük təşkil edirsə, potensial enerjinin atomlararası məsafədən asılılığının əyriliyi kiçik olur. Kimyəvi əlaqənin növü dəyişməməklə, onun zəifləməsi nəticəsində əyrinin assimetrikliyi artır və nəticədə kristalda rəqslərin anharmonikliyi və bununla əlaqədar istidən genişlənmə əmsalı da böyüyür. Bu nəticə kristal qəfəsin sərtliyinin azaldılması ilə eynidir.

Beləliklə, kristal qəfəsdə kimyəvi əlaqədə ion rabitənin payı artdıqca, istidən genişlənmə əmsalının artması, istilikkeçirmə əmsalının isə azalması müşahidə olunur.

Müasir dövrdə aşağı temperaturalarda bərk cisimlərin istidən

genişlənməsini ölçmək üçün çoxlu qurğular mövcuddur. İstidən genişlənməni müxtəlif temperatur intervalında təyin etmək üçün bu cihazların hər birində müxtəlif üsullar tətbiq olunur. İstidən xətti genişlənmənin bütün tədqiqat üsullarını makroskopik və mikroskopik olmaqla iki sinfə ayırmaq olar.

Makroskopik (dilatometrik) üsullarda temperatur dəyişən zaman nümunənin uzunluğunun dəyişməsi qeydə alınır. Bu zaman istidən xətti genişlənmə əmsalı

$$\bar{\delta} = \frac{1}{\ell} \cdot \frac{\ell - \ell_0}{\Delta T} \quad (8.5.12)$$

ifadəsi ilə hesablanır. Burada $\bar{\delta}$ - istidən xətti genişlənmə əmsalının $\Delta T = T_2 - T_1$ temperatur intervalındakı orta qiymətidir. T_1 - intervalın başlanğıc, T_2 isə son temperaturudur. ℓ və ℓ_0 uyğun olaraq T_2 və T_1 temperaturlarında nümunənin uzunluqlarıdır.

Mikroskopik (rentgen) üsullarda kristal qəfəsin periodunun temperaturdan asılılığını öyrənirlər. Bu halda istidən xətti genişlənmə əmsalı

$$\bar{\delta} = \frac{l}{a} \cdot \frac{\Delta a}{\Delta T} \quad (8.5.13)$$

münasibətindən hesablanır. Burada a - qəfəsin periodudur.

İstidən genişlənmənin tədqiqat üsulları mütləq və nisbi ola bilər. Mütləq üsullardan istifadə olunduqda birbaşa tədqiq olunan materialların istidən genişlənmə əmsalının (İGƏ) qiyməti tapılır.

Nisbi üsullar zamanı isə tədqiq olunan materialın istidən genişlənmə əmsalı dilatometrik özəyin hazırlanmış materialın İGƏ-na nəzərən ölçülür. Bu zaman istidən genişlənmə əmsalı

$$\delta_{\text{ölc}} = \delta_{\text{mad}} \pm \delta_{\text{dil.öz}}$$

düsturu ilə hesablanır.

Bir çox cihazlarda dilatometrik özək eridilmiş amorf kvardan hazırlanır. Belə ki, eridilmiş kvarsın İGƏ geniş temperatur intervalında əksər maddələrin istidən genişlənmə əmsalından bir tərtib kiçikdir.

İstidən genişlənmə əmsalının təyininə aid təcrübi üsulların əksəriyyətində nümunənin uzanması, onun ölçülərindən əhəmiyyətli dərəcədə asılı olan və asan ölçülə bilən hər hansı digər fiziki parametrin dəyişməsilə tutuşdurulur. Bəzi cihazlarda nümunənin uzunluğunun temperaturdan asılı olaraq dəyişməsini qeydə almaq üçün mexaniki və optik üsullardan istifadə edilir.

P.Q.Strelkova və S.İ.Novikovanın məlum dilatometrində nümunənin uzanması, güzgüdən əks olunan işıq ləkəsinin avtokollimatorun görüş dairəsindəki yerdəyişməsinə görə tapılır. Işıq ləkəsinin yerdəyişməsi isə okulyar mikrometr vasitəsilə ölçülür.

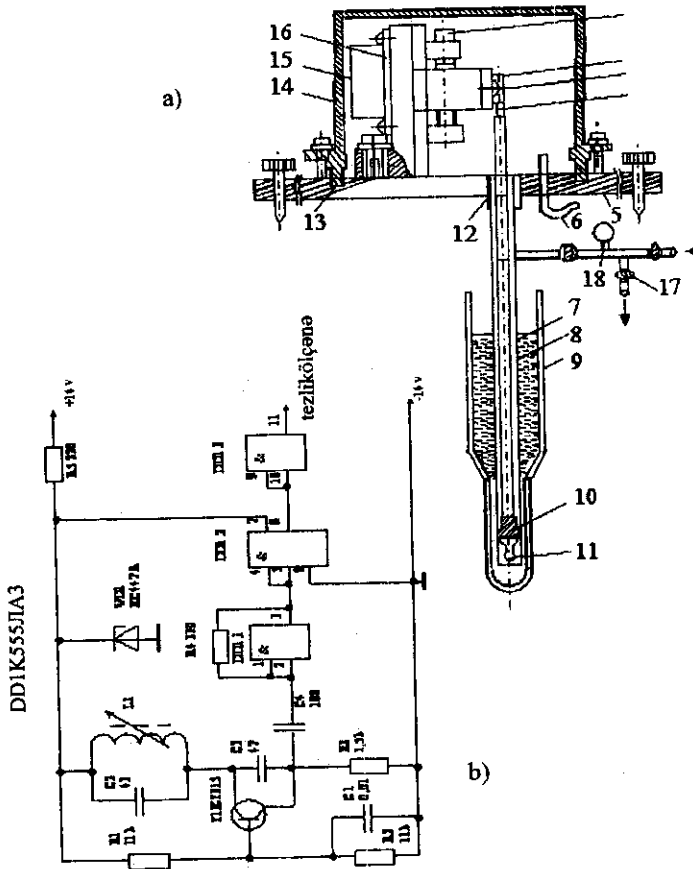
Elektrik tutumu və interferensiya cihazlarında nümunənin uzanması isə uyğun olaraq kondensatorun tutumunun qiymətinin və interferensiya zolaqlarının vəziyyətinin dəyişməsinə görə hesablanır. Qeyd edək ki, interferensiya üsulu 10K-dən 1000K-ə qədər geniş temperatur oblastında maddələrin istidən genişlənməsini tədqiq etmək üçün istifadə olunan ən etibarlı mütləq tədqiqat üsullarından biridir.

Bununla belə istidən genişlənməni ölçmək üçün mövcud olan cihazlara bir sıra qüsurlar xasdır. Onlardan bəzilərində uzanmanı ölçü cihazına ötürən sistem mükəmməl olmadığından nümunənin uzunluğunun kiçik dəyişmələrində lazım olan dəqiqliyi təmin etmək mümkün olmur. Yüksək ölçü dəqiqliyi ilə fərqlənən interferensiya və tutum cihazları isə mürəkkəb aparatların tətbiqini tələb edir. Bu isə adi laboratoriya şəraitində onlardan istifadəni çətinləşdirir. Bundan başqa interferensiya üsulundan istifadə zamanı əsas çətinlik tədqiq olunan nümunələrin dəqiq emal olunma zərurəti ilə əlaqədardır. Bəzi cihazlarda isə, xüsusən də aşağı temperaturalarda, nümunənin temperaturunu səlissə nizamlayan sistem olmur. Bütün bu deyilənləri nəzərə alaraq lazımı ölçü dəqiqliyini təmin edən, habelə quruluşuna görə öz prototiplərinə nisbətən daha sadə və tədqiqat zamanı böyük zəhmət tələb etməyən qurğunun yığılması xüsusi əhəmiyyət kəsb edir.

Vəsaitdə təsvir olunan qurğu E.M.Qocayev, M.M.Zərbəliyev və M.M.Qurbanov tərəfindən işlənib hazırlanmışdır. O, daha sadə və mükəmməldir. Belə ki, diferensial müqavimətin seçilməsi və dərəcələnməsi müəyyən çətinliklərlə bağlıdır. Bu çətinliklər hər iki qolun simmetrikliliyi, ölçmə zamanı işçi nöqtənin yerdəyişməsinin fotorezistorun (FSK-Q7) müqavimətinin işıqlanmadan asılılıq əyrisinin xətti hissəsində olması zərurəti, habelə, ciddi şəkildə kənar işıqlanmadan mühafizə və s. ilə bağlıdır.

Təsvir olunan qurğuda uzanmanı qeyd edən sistem kimi elektrik sxemindən istifadə olunur. Bu sistemin əsas elementi yüksək tezlikli sönməyən elektromaqnit rəqsləri yaradan sadə rəqs konturudur. Uzanmanın ötürülməsi sistemi məlum işdə verilən sistemdən az fərqlənir. Lakin bu qurğuda çərçivə, güzgücük, işıqlandırıcı, tutqac, işıqdan mühafizə kamerası, pəncərə və diferensial FSK-Q7 fotomüqaviməti yoxdur.

Təcrübi qurğu aşağıdakı əsas hissələrdən ibarətdir (şəkil 8.9.): 1- qeydetmə sistemini bərkidən vintlər, 2- daxili diametri $2 \cdot 10^{-3}$ m olan kvars boruya PELŞO naqilindən sarınmış 30 sarğısı olan induktiv sarğac, 3- induktiv sarğacın bərkidildiyi arabacıq, 4- ferrit çubuq, 5-yönəldiciləri olan dayaq, 6-naqillərin və termocütlərin çıxarıldığı borucuq, 7-ərinmiş kvarsdan hazırlanmış itələyici çubuq, 8-kvars boru, 9-düar qabı, 10 - nü-



Şək.8.9. Bərk cisimlərin istidən xətti genişlənmə və izotermik sıxılma əmsallarını ölçmək üçün dilatometr (a) və uzunluğunun dəyişməsinə qeyd edən sistemin prinsipial sxemi (b)

- 1- qeydetmə sistemini bərkidən vintlər, 2- daxili diametri $2 \cdot 10^{-3}$ m olan kvars boruya PELŞO naqilindən sarınmış 30 sarğısı olan induktiv sarğac, 3- induktiv sarğacın bərkidildiyi arabacığı, 4- ferrit çubuq, 5-yönəldiciləri olan dayaq, 6-naqillərin və termocütlərin çıxarıldığı borucuq, 7-ərinmiş kvarsdan hazırlanmış itələyici çubuq, 8-kvars boru, 9-düar qabı, 10-nümunə, 11- nümunənin saxlayıcı boyunca nizamlanması üçün teflon diafraqma, 12-mis oturacaq, 13-rezin aralıq qat, 14- qapaq, 15-içerisində rəqs konturu yerləşdirilmiş ekranlayıcı metal qutu, 16- uzanmanı və ya sıxılmanı qeyd edən sistem, 17-sistemin havasını sormağ üçün çıxış, 18-təzyiqli ölçmək üçün manometr.

munə, 11- nümünənin saxlayıcı boyunca nizamlanması üçün teflon diafraqma, 12-mis oturacaq, 13-rezin aralıq qat, 14- qapaq, 15-içərisində rəqs konturu yerləşdirilmiş ekranlayıcı metal qutu, 16- uzanmanı və ya sıxılmanı qeyd edən sistem, 17-sistemin havasını sormağ üçün çıxış, 18-təzyiqi ölçmək üçün manometr [90].

Uzanmanı qeydə alan sistemdə kağız dielektrikli C1 kondensatoru istisna olmaqla qalan bütün kondensatorlar slyudadan hazırlanıb. Tranzistor T1-KTZ61V, rezistorlar isə MLT-0,25 tiplidir. Qidalanma gərginliyi 14V-dur. Rəqslərin tezliyi Ç3-33 markalı tezlikölçənlə ölçülmüşdür.

Qurğuda ölçmələr aşağıdakı ardıcılıqla aparılır: tədqiq etdiyimiz nümünə silindrik formalı olub diametri 5 mm, uzunluğu isə 30 mm-dir. Nümünənin üzərinə onu qızdırmağ üçün ipək izolyasiyalı, diametri 0,1 mm olan konstantan məftilinə məxsusi maqnit sahəsini istisna etmək məqsədilə bifilyar olaraq sarınır. Nümünənin bütün hissələrinin bərabər qızmasını təmin etmək üçün bu sarğuların səthi nazik BF-2 yapışqan təbəqəsi ilə örtülür.

Nümünənin temperaturu (77-400)K intervalında mis-konstantan termocütü vasitəsilə ölçülür. Ölçmələrin etibarlılığını artırmağ naminə biri nümünənin tən ortasına, digər ikisi isə aşağı və yuxarı ucları bərkidilməklə üç termocütdən istifadə edilir.

Nümünə BF-2 yapışqanı ilə itələyicinin sonuna müvafiq vəziyyətdə yapışdırılır. Sonra nizamlayıcı 4- vintinin köməkliyi ilə 3 arabacığının yerini dəyişərək elə vəziyyət alınır ki, itələyiciyə yapışdırılmış ferrit çubuğun yuxarı ucu induktiv sarğacın təqribən ortasına qədər onun içinə daxil olur. Bundan sonra mis qapaq bərkidilir və qurğunun havası sorulur. Dürar qabına maye azot tökülür. Sonra uzunluğu qeydə alınan sistemdə rəqslərin tezliyi tezlikölçənlə ölçülür və bu vəziyyət fiksə edilir. Qızdırıcının köməkliyi ilə nümünənin temperaturu dəyişdirilir. Nümünə istidən genişləndikdə ferrit çubuq sarğaca daha çox daxil olur və onun induktivliyini artırır. İnduktivliyin artması rəqs konturunda rəqslərin tezliyinin azalmasına səbəb olur. Tezliyin dəyişməsi tezlikölçən vasitəsilə qeydə alınır. Beləliklə, nümünənin uzunluğunun temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi, uzanmanı qeydə alan sistemdə tezliyin dəyişməsinə gətirib çıxarır.

İstidən genişlənmənin tədqiqi zamanı alınan nəticələr adətən nisbi uzanmanın

$(\Delta l / l_0 = f(T))$, yaxud istidən xətti genişlənmə əmsalının $(\alpha = f(T))$ temperaturdan asılılıq qrafikləri şəkilində verilir.

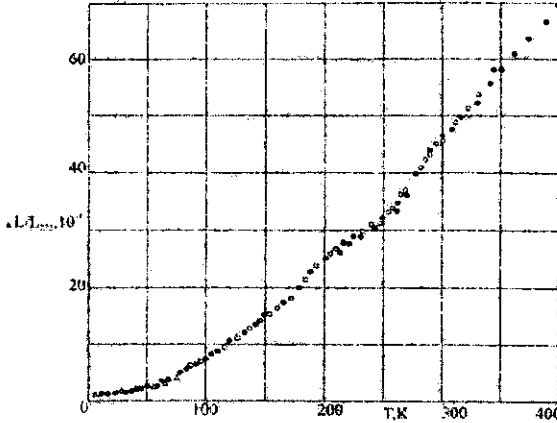
$\Delta l / l_0 = f(T)$ qrafikləri təcrübi məlumatlar əsasında qurulur. $\Delta l = l_1 - l_0$. Burada l_1 , T_1 temperaturunda, l_0 isə T_0 temperaturundan

nümunənin uzunluğunun qiymətləridir.

$\delta = f(T)$ qrafikləri isə $\Delta\ell/\ell_0 = f(T)$ əyrisinin diferensiallanması ilə qurula bilər. Belə ki,

$$\alpha = \frac{1}{\ell} \cdot \frac{d\ell}{dT}$$

kimidir.



Şek. 8.10. Alüminiumun nisbi uzanmasının temperatur asılılığı:
○ - və Δ - ədəbiyyatdakı qiymətlər, ● - təcrübi nəticələrdir.

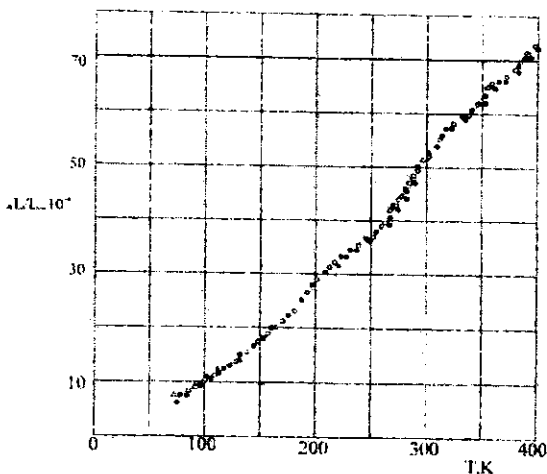
Dərəcələnmə üçün etalon kimi kimyəvi təmiz misdən yonulmuş uzunluğu $3 \cdot 10^{-2}$ m və diametri $5 \cdot 10^{-3}$ m olan nümunə götürülmüşdür. Bu zaman misin istidən genişlənməsinə aid ədəbiyyatdan məlum olan məlumatlardan istifadə edilmişdir.

Cihazı yoxlamaq məqsədi ilə alüminiumun istidən genişlənməsi ölçülmüşdür. Ölçmələrin nəticələri göstərmişdir ki, alüminiumun istidən genişlənməsi etalon nümunənin istidən genişlənməsinə nəzərən 0,2% dəqiqliklə təyin edilir (şəkil 8.10).

Ölçmə metodikası kvarsın genişlənməsinə düzəliş verilmədən ötürməyə imkan verir. Cihazın yığılması xüsusi çətinlik törətmir. Cihazın təsvirindən görüldüyü kimi bu qurğuda kiçik dəyişiklik etməklə nümunəni çıxarmadan onun izotermik sıxılma əmsalını da ölçmək olar (şəkil 8.11).

Qeyd edək ki, aşağı temperaturlarda istidən genişlənmə əmsalının təcrübi qiymətləri əsasında bərk cisimlərin qəfəs dinamikasının öyrənilməsi son zamanlar diqqət mərkəzində durur. Belə ki, bu cür

tədqiqatlar kristallarda kimyəvi əlaqənin xarakteri, qüvvələrin anharmonikliyi haqqında informasiya almağa və onlarda baş verən faza keçidlərini aşkara çıxarmağa imkan verir.



Şək.8.11. Alüminiumun izotermik sıxılmasının temperatur asılılığı: ○ - və Δ - ədəbiyyatdakı qiymətlər, ● - təcrübi nəticələrdir.

§8.6. Qeyri-əsas yükdaşıyıcıların diffuziya uzunluğunun və yaşama müddətinin təyini üsulları

Diffuziya uzunluğunun və yaşama müddətinin ölçülməsi üsulları stasionar və qeyri stasionar olmaqla iki yerə bölünür: qeyri stasionar üsullarda elektrik yükdaşıyıcıların artıq konsentrasiyasının və ya onunla mütənasib olan ixtiyari fiziki kəmiyyətin (elektrik və fotokeçiriciliyin, kollektor cərəyanının və s.) zamandan asılılığı tədqiq edilir. Xətti rekombinasiya halı üçün bu asılılıq eksponensialdır: $\Delta n(t) = \Delta n(0)e^{-t/\tau}$ (burada, τ - orta yaşama müddətidir. Yaşama müddəti $\ln \Delta n = f(t)$ eksperimental asılılığın düz xətti hissəsinin meyl bucağına əsasən təyin edilir.

Elektron-deşik cütlərinin rekombinasiya sürəti qeyri-əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddətinə görə təyin edilir və buna görə də nümunədə hər hansı bir fiziki effektdə görə təyin edilmiş elektron-deşik cütlərinin konsentrasiyasının relaksasiya müddəti- qeyri əsas yükdaşıyıcıların orta yaşama müddətinə bərabərdir.

Qeyri stasionar üsullara keçiriciliyin modulyasiya üsulu,

fotokeçiriciliyin kinetikasi, FEM- effekti, kinetikasi, hərəkət edən işıq zondu üsulu aiddir.

Stasionar üsullar hər hansı fiziki hadisənin eksperimental ölçülmüş əmsalı ilə yaşama müddəti və ya diffuziya uzunluğu daxil olan nəzəri müqayisəsinə əsaslanır (stasionar fotokeçiricilik üsulu və FEM effekti, fotodiodun qısa qapanma cərəyanı üsulu, hərəkətdə olan işıq zondu üsulu). Stasionar üsullarda həssashığı artırmaq üçün əksər hallarda nümunədə yükdaşıyıcıların əlavə konsentrasiyasını yaratmağın modulyasiya üsulundan istifadə olunur. Bu prosesdə stasionar hal əldə etmək üçün heyacanlandırıcı impulsunun davam etmə müddəti yükdaşıyıcıların orta yaşama müddətindən çox böyük olmalıdır.

Nöqtəvi kontaktda keçiriciliyin modulyasiyası üsulu xüsusi müqaviməti $10^{-1}-10^2$ Om.sm olan Ge və Si

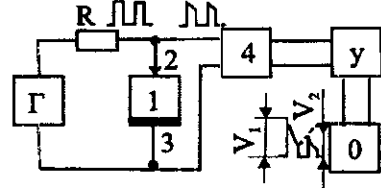
nümunələrində qeyri-əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddətini (τ -nu) təyin etməyə imkan verir. Bu nümunələrdə yaşama müddətinin ölçülən qiymətləri $(3-500) \cdot 10^{-6}$ san. olmuşdur. Üsulun prinsipial sxemi şəkil 8.12-də göstərilmişdir. İnjeksiyaedici nöqtəvi kontakt yaradan metallik zonda (2) yarımkəçirici nümunənin (1) müstəvi üzünə sıxılır.

II kontakt (3) rolunu böyük sahəli nümunə tutqacı oynayır. Zonda t zaman fasiləsi ilə iki düzbücaqlı cərəyan impulsu verilir (t-ləngimə müddəti adlanır). Nümunədəki gərginlik impulslarının qiyməti nümunənin kontaktyanı hissəsinin xüsusi müqaviməti ilə mütənasibdir. İmpulsun davam etdiyi müddətdə tarazsız yükdaşıyıcıların kontaktyanı oblasta injeksiyası baş verir, bu isə keçiriciliyin artmasına səbəb olur. Nəticədə impulsun boyu bir qədər kiçilir.

İmpuls kəsildikdən sonra nümunədə əlavə elektronların və deşiklərin rekombinasiyası baş verir. Əgər II impuls t ləngimə müddətindən sonra verilsə və bu müddət yaşama müddəti τ ilə eyni tərtibdədirsə ləngimə müddətində nümunənin keçiriciliyi tarazlıq halındakı qiymətini ala bilmir və II gərginlik impulsunun amplitud qiyməti I impulsundakından kiçik olur. Göstərmək olar ki, I və II impulsların amplitudları fərqi ləngimə müddəti t-dən asılı olaraq eksponensial qanun üzrə azalır:

$$V_1 - V_2 = \text{const} e^{-t/\tau}$$

Nümunədə gərginlik impulslarının osilloqramlarını çıxarmaqla



Şəkil 8.12. Keçiriciliyin modulyasiyası üsulunun struktur sxemi. 1- nümunə 2-emittor zondu, 3- nümunə tutqacı, 4- məhdudlaşdırıcı, İG- impuls generatoru, 5- gücləndirici, EO- elektron ossilloqraf

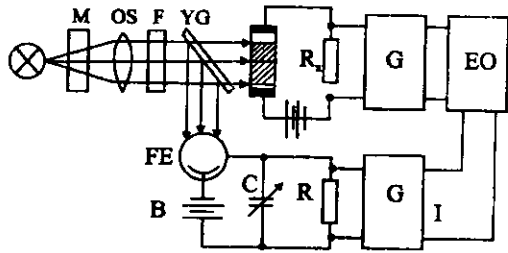
$\ln(V_1 - V_2) = f(t)$ asılığının xətti hissəsinin tangensindən yaşama müddətini tapmaq olar.

Bu üsulun mahiyyəti ondan ibarətdir ki, qeyri -xəttiliyi ölçmə nəticəsini təhrif edən kollektor kontaktından istifadə olunmur.

Yaşama müddətinin fotokeçiriciliyin kinetikasına əsasən ölçülməsinin üç üsulu vardır:

1. Fotokeçiriciliyin sönməsi üsulu;
2. Faza üsulu;
3. Tezlik üsulu.

Bu üsulların hamısı nümunənin işıqlandırılması zamanı fotokeçiriciliyin əlavə yüklərin konsentrasiyası ilə mütənəzib olmasına əsaslanır. Fotokeçiriciliyin sönməsi üsulu impulsun arxa cəbhəsinin formasının təhlilinə əsaslanmışdır. Işıq impulsunu söndürən andan başlayaraq nümunədə fotokeçiricilik ümumiyyətlə desək mürəkkəb qanunla azalacaq. Lakin $t \approx 2\tau$ müddətindən sonra bu asılıq $e^{-t/\tau}$ şəklinə düşəcək və yaşama müddəti τ -nu tapmaq mümkün olacaq. Yaşama müddətinin fotokeçiriciliyin azaldılmasına görə təyininin tipik sxemi şəkil 8.13-də göstərilmişdir.



Şəkil 8.13. Fotokeçiriciliyin kinetikasına görə yaşama müddətinin təyini sxemi

M - modulyatoru düzbucaqlı işıq impulsu formalaşdırır ki, bu da öz növbəsində F- filtrindən və OS -optik sistemindən keçərək nümunə üzərinə düşür. Nümunənin elektrik keçiriciliyi işığın təsiri ilə artdıqdan onunla ardıcıl qoşulmuş R_x müqavimətindəki gərginlik düşgüsü dəyişir. R_x -in çıxışından siqnal gücləndirilərək osilloqrafa ötürülür.

Yaşama müddətini tapmaq üçün osilloqrammanı qrafiki təhlil etmək əvəzinə köməkçi eksponenta ilə müqayisə üsulundan istifadə olunur. RC konturu ilə birləşmiş vakuüm fotoelementi (FE) üzərinə yarı şəffaf güzgüdən (YG) əks olunan işıq düşür. Çıxışdakı siqnal da osilloqrafa ötürülür. Beləliklə, hər iki siqnala uyğun osilloqramları müqayisə etməklə yaşama müddəti təyin olunur.

Bu sxemdən yaşama müddətini faza üsulu ilə ölçmək üçün də istifadə etmək olar. Bu halda M- modulyatoru ω -tezlikli sinusoidal siqnal yaradır.

Fotokeçiricilik siqnalı həyəcanlaşdırıcı siqnaldan fazaca φ qədər geri qalır. Fazanın bu qiyməti τ yaşama müddəti ilə $\tau\varphi = \omega\tau$ münasibəti ilə bağlıdır.

Ossilloqraf vasitəsilə fotokeçiricilik siqnalının fazası ilə kiçik ətalətli köməkçi fotoelement siqnalının fazası müqayisə edilir. Bu halda RC-dövrəsi faza fırladıcı element rolunu oynayır.

Yaşama müddətinin ölçülməsində tezlik üsulu ona əsaslanmışdır ki, modulyasiya tezliyinin artması ilə fotokeçiricilik siqnalının amplitudu $\sim (1 + \omega^2 \tau^2)^{-1/2}$ qanunu üzrə azalır. $\omega \tau = 1$ olduqda $\sim (1 + \omega^2 \tau^2)^{-1/2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \approx 0,71$ qiymətini alır.

Siqnalın amplitudu stasionar fotokeçiricilik siqnalının ($\omega \tau \ll 1$) 0,71 hissəsinə bərabər olan ω -ni təyin edib, yaşama müddətini τ -ni hesablamaq olar. Faza üsuluna əsaslanan tipik ölçü qurğusu faza xüsusi müqaviməti 100 Om.sm-dən böyük olan silisiumda $(50-3000) \cdot 10^{-6}$ san diapazonunda yaşama müddətini ölçməyə imkan verir.

Hərəkət edən işıq zəndü üsulu. Bu üsul da qeyri stasionar üsullara aiddir. Üsulun üstünlüyü ondadır ki, yükdaşıyıcıların τ yaşama müddətini və diffuzion L uzunluğunu bir-birindən asılı olmadan ölçməyə imkan verir. Bu parametrlər vasitəsi ilə diffuziya əmsalı D -ni $\left(D = \frac{L^2}{\tau} \right)$ və

Eynşteyn münasibətinə əsasən yürüklüyü $\mu = D \left(\frac{e}{kT} \right)$ hesablamaq olar.

Belə təyin olunmuş yürüklük diffuziya yürüklüyü adlanır.

Hərəkət edən işıq zəndü üsulunun sxemi şəkil 8.14-də təsvir olunmuşdur.

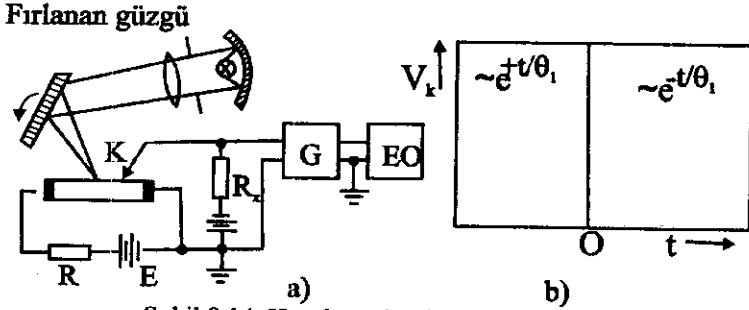
Kollektor zonada «qaytan» şəkilli nümunənin müstəvi səthi üzərindəki ixtiyari nöqtə üzərinə qoyulur. İşıq şüası bu müstəvi üzrə rəqsi hərəkət edir. Nöqtəvi kontakt oblastında qeyri əsas yükdaşıyıcıların əlavə konsentrasiyalarının qiyməti ilə müəyyən edilən kollektor cərəyanın zamandan asılı olaraq $A \cdot e^{-\theta_1 t}$ və $B \cdot e^{-\theta_2 t}$ kimi iki eksponensial qanun üzrə dəyişir. Burada θ_1 işıq ləkəsinin kollektora doğru hərəkətinə, θ_2 -isə işıq ləkəsinin kollektordan uzaqlaşmasına uyğun gəlir. A və B sabit vuruqlardır.

Kəsilməzlik tənliyinin həlli θ_1 və θ_2 üçün rekombinasiya parametrləri daxil olan ifadələr verir və göstərmək olar ki, qeyri əsas yükdaşıyıcıların yaşama müddəti $\tau = \theta_1^{-1} + \theta_2^{-1}$ diffuziya uzunluğu isə $L = v \sqrt{\theta_1 \theta_2}$ kimi ifadə olunur. Burada v - işıq ləkəsinin kollektora nisbətən hərəkət sürətidir.

θ_1 və θ_2 kəmiyyətləri şəkil 8.14b-də göstərilən ossiloqramaya əsasən təyin edilir.

Bu üsulun köməyi ilə səthi rekombinasiya sürəti S-ile tapmaq mümkündür. Doğrudan da müxtəlif d_1 və d_2 qalınlıqlı iki nümunə L_1 və L_2 diffuziya uzunluqlarını ölçməklə (bu şərtlə ki, səthlər eyni cür emal edilmiş olsun) S-i aşağıdakı ifadədən təyin etmək olar

$$S = \left\{ \frac{Dd_1d_2}{2(d_2 - d_1)} \right\} (L_1^2)^{-1} - (L_2^2)^{-1}$$

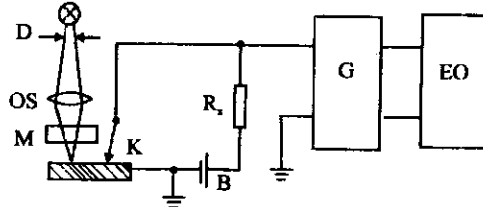


Şəkil 8.14. Hərəkət edən işıq zəndu üsulu:

a) - ölçmə üsulunun sxemi, b) - kollektor cərəyanının osilloqramı

Çox vaxt diffuziya uzunluğunu daha sadə üsulla təyin edirlər. Bu üsul stasionar ölçmə üsulları sinfinə aid edilən hərəkət edən işıq zəndu üsuludur. Bu üsul əlavə yükdaşıyıcıların fəzada paylanmasının ölçülməsinə əsaslanmışdır.

Bu paylanma $\Delta n(r) = \Delta n(0)e^{-r/L}$ ifadəsi üzrə baş verir; L- diffuziya uzunluğu, r-isə işıq ləkəsi ilə kollektor zəndu arasındakı məsafədir. Daha ciddi təhlil etməklə göstərmək olar ki, $\Delta n(r)$ -kəmiyyətinin eksponensial azalması $r \gg L$ oblastına uyğun gəlir. Burada da



Şəkil 8.15. Hərəkət edən işıq zəndu üsulunun prinsipial sxemi. OS- optik sistem, M- modulyator, G- ensiz zolaqlı ölçmə gücləndiricisi, k-kollektor, D- diafraqma. B- batareya

ölçmə xətası artır. Ona görə də bu asılılığı $\Delta n(r) = \Delta n(0)H(r/L)$ şəkilli Xankel funksiyası ilə vermək məqsədəuyğun hesab edilir. Eksperimental əyri $H=f(r)$ dərəcələnmə əyriləri ilə müqayisə edilir. L- kəmiyyəti dəyişən parametrdir. Üst-üstə düşən hissələr $a/4 > r > d/5$ intervalı ilə təyin edilir. a və d uyğun olaraq işıq zolağının uzunluğu və enidir.

Qurğunun sxemi şəkil 8.15-də göstərilmişdir. Işıqlanma

modulyasiyası olunur ki, qeyri əsas yükdaşıyıcıların tam konsentrasiyası ilə mütənasib olan kollektor cərəyanından işığın təsiri ilə yaranan əlavə yükdaşıyıcıların konsentrasiyası ilə mütənasib olan cərəyanı ayırmaq mümkün olsun.

Çıxış signalını qeyd etmək üçün işığın modulyasiya tezliyinə köklənmiş, ensiz zolaqlı ölçü gücləndiricilərindən istifadə olunur.

Modulyasiya tezliyi kifayət qədər kiçik olmalıdır ki, işıq impulsunun təsir etdiyi müddət ərzində stasionar hal bərpa olunsun ($T_{\text{ışıq}} \geq \tau$). Bu üsul diffuziya uzunluğunu ölçmək üçün çox geniş tətbiq olunur. Məsələn, bu üsulla germanium nümunələri üçün $L=0,1 \div 0,5$ mm qiymətləri alınmışdır.

ƏDƏBİYYAT

1. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978, 615 с.
2. Аскеров Б.М. Кинетические эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1970, 303 с.
3. Əsgərov B.M. Bərk cisimlər nəzəriyyəsi. BDU-nun nəşriyyatı, Bakı, 2001, 154 s.
4. Tahirov V.İ. Yarımkeçiricilər fizikasının əsasları. «Maarif» nəşriyyatı, Bakı, 1984, 326 s.
5. Zərbəliyev M.M. Yarımkeçiricilərin elektrofiziki parametrlərini ölçmə üsulları. SDU-nun nəşriyyatı, Sumqayıt, 2004, 117 s.
6. Zərbəliyev M.M., Məmmədov E.H., Nağıyev Ə.V. Yarımkeçiricilər fizikasından praktikum. Sumqayıt, 2006, 106 s.
7. Займан Дж. Принципы теории твердого тела: Пер.с англ. М.:Мир, 1974, 416 с.
8. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Наука, 1976, 540 с.
9. Киреев П.С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1975, 584с.
10. Горбачев В.В., Спицына Л.Г. Физика полупроводников и металлов. М.: Металлургия. 1982, 435 с.
11. Павлов Л.П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов. М.: Высшая школа. 1987, 240 с.
12. Пасынков В.В., Чиркин Л.К. Полупроводниковые приборы. Изд-во «Высшая школа», Москва, 1987.
13. Лысов В.Ф. Практикум по физике полупроводников. М.: Просвещение., 1976, 207 с.
14. Ржанов А.В. Электронные процессы на поверхности полупроводников. М.: Наука, 1971, 480 с.
15. Федотов Я.А. Основы физики полупроводниковых приборов. М.: Советское радио. 1967, 592 с.
16. Крапухин В.В., Соколов И.А., Кузнецов Г.Д. Физико-химические основы технологии полупроводниковых материалов. М.: Металлургия. 1982, 352 с.

ZƏRBƏLİYEV MƏHƏMMƏDƏLİ MƏZAHİR oğlu

YARIMKEÇİRİCİLƏR
FİZİKASI

Ali məktəb tələbələri üçün dərs vəsaiti

Yığılmağa verilib: 08.01.08. Çapa imzalanıb: 2101.08.
Format 60x84 $\frac{1}{16}$. F.ç.v. 28,5. Sifariş № 12.
Kağız əla növ. Tiraj 500 nüsxə. Qiyməti müqavilə ilə

“Tİ-MEDIA” şirkətinin mətbəəsi