

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI
A.NAVOIY NOMIDAGI
SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI
FIZIKA FAKULTETI
QATTIQ JISMLAR FIZIKASI KAFEDRASI

QATTIQ JISMLAR FIZIKASI fanidan

KURS ISHI

MAVZU: KRISTALLARDAGI ATOMLARNING
BOG'LANISH TURLARI

Bajardi: 403 gurux talabasi Ermatova M.

Raxbar: dots. A.A.Eshbekov

Samarqand 2015

KRISTALLARDAGI ATOMLARNING BOG'LANISH TURLARI

Reja:

1. Kirish

2. KRISTALLARDAGI ATOMLARNING BOG'LANISH TURLARI

2.1. Kristall tuzilishi.

2.2. Ion bog'lanish.

2.3. Metall bog'lanish.

2.4. Kovalent bog'lanish.

3. BOG'LANISH TURLARINING KRISTALL TUZILISHGA BOG'LIQLIGI

3.1. Ionli bog'lanishda «Modelung energiyasi».

3.2. Metall bog'lanishining kristall tuzilishiga bog'liqligi.

3.3. Kovalent bog'lanishdagi σ va π bog'lanishlar.

3.4. Yarimo'tkazgichlaryuzasining real holdagi energetik tuzilishi

4. XULOSA

ADABIYOTLAR

KIRISH

1970 yillargacha "Qattiq jismning deyarlik barcha asosiy xususiyatlari uning hajmi holatiga (tarkibi, tuzilishiga) bog'liq" deb qaralar edi. Ammo bu davrga kelib jismning juda ko'p xossalari uning yuza qatlamlarining holatiga uzviy ravishda bog'liq ekanligi aniqlana boshlandi. Masalan, jismlarning emission va optikaviy xususiyatlari, korroziyaga va ayrim mexanik ta'sirlarga chidamliligi birinchi galda yuzaning tarkibiga va tuzilishiga bog'liq ekanligi ma'lum bo'lib qoldi. Hozirgi paytda qattiq jismning deyarli barcha fizik xususiyatlari, hattoki ayrim mexanik xossalari va ko'pgina kimyoviy xossalari uning yuzasining holati bilan aniqlanishi tajribada isbotlangan. Shuning uchun ham 1970 yillardan boshlab yuzalarni tadqiq qilish va uni o'rganish uchun yangi maxsus usullar ishlab chiqishga juda katta ahamiyat berila boshladi.

Jismning yuza qatlamlari alohida, o'ziga xos bo'lgan murakkab xususiyatlarga ega bo'lib, ular hajmiy xususiyatlardan keskin farq qiladi. Bunday farqlarning juda ko'p sabablari bor. Hattoki, ideal holgacha tozalangan va bir xil tarkibli kristallarda ham yuza va hajm xususiyatlari farq qiladi. Chunki, masalan, hajmda joylashgan atomlar o'zining to'rt tarafidan atomlar bilan bog'langan bo'lsa, yuzadagi atomlar faqat uchta tomondan bog'lanib, tepada atomlar yo'q bo'lganligi uchun to'rtinchi tomondan bog'lanmagan bo'ladi.

Qattiq jismlarni, o'zlaridagi atomlarning, molekulalarning yoki ionlarning o'zaro joylashish tartibiga qarab kristallarga va amorf jismlarga ajratadi.

Ulardagiasosiytafovut

–

fazodajoylashganzarrachalariningtartiblilikdarajasidir.

Amorfjismlardafaqatyaqin,

tartibbor,

ya'niengyaqinqo'shniatomlarningjoylashishidama'lumqonuniyatmavjud.

Kristalljismlaryaqinvauzoqtartibmavjudligibilanxarakterlanadi,

ya'niundagibarchaatomlaraniqbirtartibbilanjoylashib,

ma'lumbirfazoviy

strukturanihosilqiladi. Kristallvaamorffjismlar
strukturasidagitafovutulardagifizikxususiyatlarningharxilbo'lishiga
sababbo'ladi. Jumladan, kristallardamexanik, optik,
elektrvaboshqako'pginafizikxossalarianizatropdir,
ya'nibuxossalarkristallarningharxilyo'nalishlaridaturlichanomoyonbo'ladi.
Amorfmoddalardaesadeyarlibarchafizikxossalarizotropdir. Bundantashqari,
kristallardaaniqerishvaqotishharoratlarimavjuddir.
Amorffjismlardaesaerishvaqotishninganiqharoratimavjudemas. Erish
jarayonida amorf moddaning (shisha, smola, kanifol, ...) harorati ham
ko'tarila boradi.

Kristall va amorf qattiq jismlarning fizik xususiyatlarini o'rganish
asosida maxsus xossalarga ega bo'lgan materiallarni (o'ta mustahkam,
korroziyaga chidamli, o'ta toza, issiqlikka chidamli, ... kabi) olishga,
sanoatda hamda fan va texnikaning turli sohalarida ishlatiladigan yangi
qurilmalarni yasashga keng imkoniyat yaratildi. Masalan, kvant
elektronikasida lazer va lazerlarni yaratish o'ta yuqori chastota (SVCh)
texnikasida jadal o'zgarish hosil qildi. Shuningdek qattiq jismlardagi
dislokastiyalarning kinetikasini o'rganish asosida o'ta mustahkam materiallar
hosil qilindi. Bunday qurilmalarning yaratilishi biologiya, tibbiyot,
geologiya, matematika va boshqa fanlarning rivojlanishiga keng imkoniyat
yaratdi. Shuning uchun ham hozirgi paytda qattiq jismlar fizikasi fanini
o'rganishga jiddiy e'tibor berilmoqda.

Shunday qilib yuzadagi kristall tuzilish yoki panjara parametrlari hajmnikidan
farq qiladi. Bu esa o'z navbatida hajm va yuza elektron tuzilishlarining bir-biridan
farq qilishiga olib keladi. Yuza qatlamlarga tashqi ta'sir ko'rsatib, uning
xususiyatlarini kerakli yo'nalishda o'zgartirish mumkin. Buning uchun ionlar
implantastiyasi, lazer va boshqa nurlar bilan ishlov berish, aktiv element atomlari

va molekular o'tkazish va boshqa usullardan foydalaniladi. Bu kurs ishida bog'lanishlarni qattiq jism uchun 4 turga ajratish mumkinligi qaraladi va **ionli bog'lanishlar; metall bog'lanishlar; kovalent bog'lanishlar; Vander-Vals bog'lanishlar** haqida qisqacha to'xtalib o'tamiz. Umuman qattiq jism vujudga kelishida atomlarning valent elektronlarini sotsiyrolni o'ynaydi.

Bitta atom valent elektronining boshqa atom valent elektron bilan qanday munosabatda bo'lishiga qarab har xil bog'lanishlar mavjud bo'ladi.

Bu bog'lanishlarning har biri bilan qisqacha tanishib o'tamiz.

2. KRISTALLARDAGI ATOMLARNING BOG'LANISH TURLARI

Tayanch so'zlar:

Valent elektronlar, kimyoviy bog'lanish, fizikaviy bog'lanish, domenlar, atom, molekula, kristall panjara, tugunlararo atom, atom yadrosi, elektron, neytron, proton.

2.1. Kristall tuzilish.

Yuzalar ma'lum bir usullar bilan kimyoviy toza va yuqori darajada silliqlangan holga keltirilmasa, bu yuzalardan olingan ma'lumotlar noto'g'ri talqin qilinishi mumkin. "Yuzani tayyorlash" deganda quyidagi 3 ta kattalikni imkoni boricha ideal holatga yaqinlashtirish tushuniladi.

Bunda qattiq jism yuzasidagi har qanday chetki aralashmalarni yo'qotishga harakat qilinadi; lekin bizga ma'lumki, adsorbtsiya hisobiga yoki qattiq jism tarkibida ozgina miqdorda bo'lsa ham aralashmalarning mavjudligi tufayli chetki (begona) element atomlaridan tamoman qutilib bo'lmaydi. Agar chetki atomlarning konsentratsiyasi qattiq jism xossalari va xususiyatlariga ta'siri sezilmaydigan darajada kichik bo'lsa, bunday yuzalar kimyoviy jihatdan ideal holga yaqinroq deb qabul qilinadi. Umuman yuzada aktiv element atomlarning miqdori 0,1% dan katta bo'lmasligi maqsadga muvofiqdir.

Har qanday yuza o'ta yuqori darajada silliqlangan bo'lsa ham ma'lum bir notekisliklarga ega bo'ladi. Bu notekisliklar terrasalar, pog'onalar, vakant (bo'sh) joylar, chetki atomlar va boshqalarning yuzada mavjudligi tufayli vujudga keladi. Yuzalarni silliqlash uchun turli xil usullar qo'llaniladi. Agar bu notekisliklarning

kattaligi 5 – 6 Å dan katta bo'lmasa, bu yuza ideal holga yaqin qilib silliqqlangan deb tushuniladi.

Relaksastiya va rekonstruktsiya hisobiga yuza qatlamlarining kristall tuzilishi hajmnikidan farqqiladi. Umuman olganda, yuzaning kristall panjarasini va bu panjara parametrlarini hajmniki bilan bir xil qilish ideal toza jismlar uchun deyarli mumkin emas. **Yuzada kristall tuzilishi saqlansava uyuzaning barcha maydonlarida bir xil bo'lsa, bunday yuzani kristall tuzilishi jihatidan idealga yaqin deb qarash mumkin.** Umuman, idealga yaqin yuzalar hosil qilish uchun dastlab quyidagi usullardan foydalaniladi:

a) kristallarni tabiiy o'stirish. Ammo bu usul juda kam qo'llaniladi.

b) kristallarni yuqori vakuum sharoitida kerakli yo'nalish bo'yicha sindirish.

v) kristallarni kerakli yo'nalish bo'ylab kesish. Bu usulda yuza juda qattiq deformastiyaga uchraydi va yuzaga har xil chetki atomlar kelib o'tirishi mumkin; shuning uchun ularni silliqqlash va tozalash uchun maxsus usullar ishlatiladi.

g) maxsus tayyorlangan asoslar yuzida epitaksial plyonkalar hosil qilish.

Epitaksial plyonkalar juda yuqori vakuum sharoitida ($R \leq 10^{-8} Pa$) katta aniqlik bilan hosil qilinadi. Bunday plyonkalarning kimyoviy tozaligi, kristall tuzilishi, yuzasining silliqqligi yuqori darajada bo'lganligi uchun ular keyingi paytda mikroelektronikada keng qo'llanilmoqda.

Qattiq jismlarda atomlar bir-biriga juda yaqin joylashgan (1 – 5 Å) bo'lib, ular ma'lum bir kuch bilan tutilib turadi. Umuman qattiq jism vujudga kelishida atomlarning valent elektronlari asosiy rolni o'ynaydi. Bitta atom valent elektronining boshqa atom valent elektroni bilan qanday munosabatda bo'lishiga qarab har xil bog'lanishlar mavjud bo'ladi. Bunday bog'lanishlarni qattiq jism uchun 4 ta turga ajratish mumkin: **ionli bog'lanishlar; metall bog'lanishlar; kovalent bog'lanishlar; Vander-Vals bog'lanishi.**

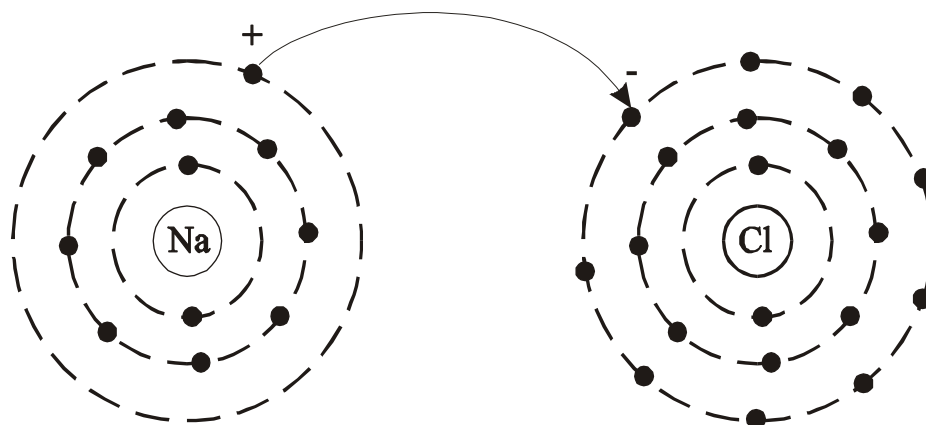
Bu bog'lanishlarning har biri bilan qisqacha tanishib o'tamiz.

2.2. Ionli bog'lanish.

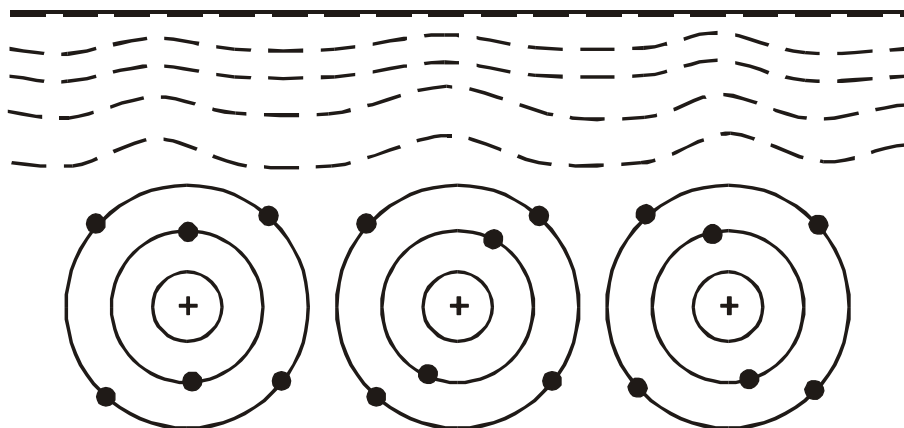
Qattiq jismning tashkil bo'lishida 2 va 3 xil atomlardan tuzilgan sistemalar orasida ionli bog'lanish ko'p holda asosiy rol o'ynaydi. Bunday bog'lanish ko'pincha valentliklari bir-biridan keskin farqqiladigan element atomlari orasida ro'y beradi. Masalan, ishqoriy (ishqoriy er) metallar bilan galogenlar orasida ionli bog'lanish ro'y berishi mumkin. Bunday bog'lanish orqali hosil bo'ladigan kristallarga misol qilib NaCl, KCl, NaBr, BaF₂, CaF₂ va boshqalarni ko'rsatish mumkin. Bunda Na bir valentli bo'lgani uchun u o'z elektronini oson beradi. Cl esa 7 valentli bo'lgani uchun u elektronni tezda biriktirib oladi va elektron qavatlarni to'ldiradi. Bunday almashinish tufayli Na "+", Cl esa "-" zaryadlanib qoladi va ular orasida Kulon kuchlari paydo bo'lib, ion bog'lanish hosil bo'ladi (1-rasm).

2.3. Metall bog'lanish.

Metall atomlari tashqi elektron qavatlar (valent) elektronlarini umumlashtiradilar. Natijada bu atomlar bir-biriga bog'lanib turadilar. Bunday bog'lanish "metall bog'lanish" deyiladi (2-rasm).



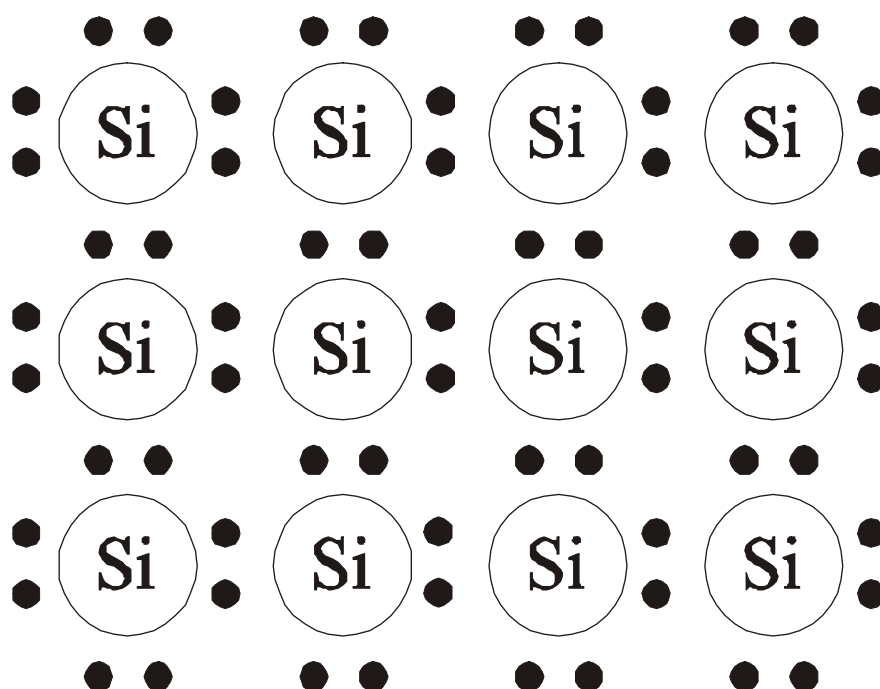
1–rasm. Ion bog'lanish hosil bo'lishining sxematik tasviri.



2–rasm. Qattiq jism atomlarining valent elektronlari umumlashib valent zonani tashkil qilishining sxematik tasviri.

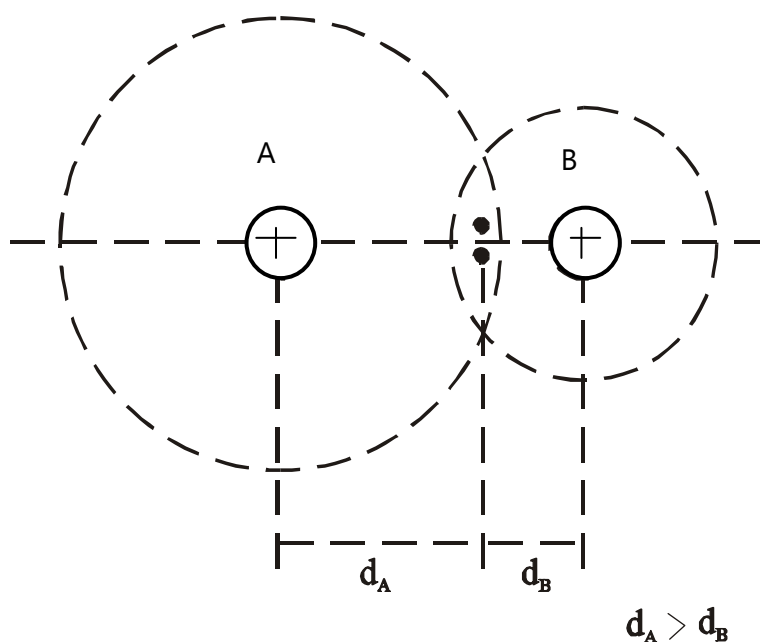
2.4. Kovalent bog'lanish.

Kovalent bog'lanishda yonma-yon turgan atomlar o'z valent elektronlarini umumlashtiradilar. Masalan: Si va Ge (3–rasm).



3–rasm. Kovalent bog'lanishning sxematik tasviri.

Ayrim hollarda 2 xil atomlardan tashkil topgan yarim o'tkazgichlarda ham kovalent bog'lanish ro'y berishi mumkin. Bu holda turli xil atomlarning tashqi elektron qavatdagi elektronlar soniga qarab, umumlashgan elektronlar qaysidir bir tur atom tomonga siljigan bo'lishi mumkin. Masalan: A va V atomlarning bog'lanishini ko'raylik (4–rasm). Bu erda umumlashgan elektronlar V atomga yaqinroq joylashgan. Shuning uchun ham A atom musbat (+), V atom manfiy (–) zaryadlangandek ko'rinadi. Bunday bog'lanishlarni qisman ion bog'lanish va qisman kovalent bog'lanish deb qarash mumkin. Umuman u "ion-kovalent bog'lanish" deb ataladi.



4–rasm. Ion – kovalent bog'lanishning sxematik tasviri.

Si, Ge, GaAs, GaP kabi qattiq jism elektronikasi, jumladan, mikroelektronika sohasida eng ko'p ishlatiladigan va istiqbolli yarim o'tkazgichlar kovalent va ion-

kovalent bog'lanishga ega. Ion-kovalent bog'lanishda ionlashishdarajasi I va kationdan anionga o'tgan zaryad (elektron) sonini Δq aniqlash alohida ahamiyatga ega. Bu kattaliklarni aniqlashda ikkilamchi yoki fotoelektron spektroskopiya usullaridan foydalanish mumkin. Bu usullar bilan biror atom ikkinchi atom bilan kimyoviy birikma hosil qilish jarayonida ularning valent zonaga yaqinroq joylashgan negiz elektron sathlarning energetik siljishi aniqlanadi. Masalan, kremniy bariy bilan birikib, BaSi va BaSi₂ birikmalarni hosil qiladi. Bunda kremniyning L₂₃ sathi 2 – 3 eV ga kichik energiyali tomonga siljiydi. Bu esa, kremniy bariydan qisman \bar{e} olganligini bildiradi. Kremniy kislorod bilan birikma hosil qilganda kremniyning L₂₃ sathi katta energiya tomonga siljiydi. Bu esa kremniy o'z elektronini kislorodga berayotganini ko'rsatadi. Aniqlangan kimyoviy siljish yordamida kationdan anionga o'tayotgan zaryad miqdori Δq quyidagi formuladan topiladi:

$$\Delta q = \frac{\Delta E}{e^2} \left(\frac{A(r)}{r} - \frac{\alpha}{R} \right) \quad (1)$$

α – Modelung doimiysi; ΔE – negiz sathning kimyoviy siljish kattaligi; r – kationning ion radiusi; R – kation va anion orasidagi masofa; $A(r)$ – geometrik faktor bo'lib, quyidagi formuladan topidi:

$$A(r) = \frac{1 - \Gamma^2}{1 - \Gamma^3}; \quad \Gamma \approx 0,5 \quad (2)$$

Ionlashish darajasi Poling formulasi bilan topiladi:

$$I = \frac{\chi_A - \chi_B}{|\chi_A - \chi_B|} \left(1 - e^{-\frac{1}{4}(\chi_A - \chi_B)^2} \right) \quad (3)$$

χ_A – asosning (matristaning) elektron qabul qiluvchanligi (o'tkazuvchanlik zonasining kengligi).

χ_B – matrasta atomlarining boshqa atomlar bilan birikma hosil qilgandan keyingi elektron qabul qiluvchanligi.

Tajribalar ko'rsatadiki, BaSi hosil bo'lishida $\Delta q \approx 1$ ga $I = 25 - 30\%$ bo'lar ekan.

3. BOG'LANISH TURLARINING KRISTALL TUZILISHGA BOG'LIQLIGI

Tayanch so'zlar:

Metallbog'lanish, kovalentbog'lanish, ionlibog'lanish, orbitallar, «Modelungenergiyasi», σ va π bog'lanishlar, $S + S$ bog'lanish, $S + P$ bog'lanish, antibog'lovchiorbitallar.

4.1. Ionlibog'lanishda «Modelungenergiyasi».

Kristallning tuzilish shukristalldagi atomlar qanday turdagi bog'lanishlardan tashkil topganligiga ham bog'liq bo'ladi. Masalan: ion bog'lanishli kristallda asosiy holda kubik panjara hosil bo'ladi. Ionli bog'lanishda shuni eslatib o'tish kerakki, masalan Na va Cl ionlari bir-birini tutib turish kattaligini aniqlaydigan energiya vujudga keladi. Bu panjarada har bir atomning atrofida yaqin joylashgan qo'shni atomlar mavjud bo'ladi. Bu energiya "Modelung energiyasi" deyiladi. Modelung energiyasi NaCl uchun eng katta bo'ladi. Uning eng xarakterli xususiyatlari quyidagilardan iborat: a) ionli bog'lanish kuchining yo'naltirilmaganligi; b) bir xil ismli zaryadlar bir-biridan imkon qadar uzoqda joylashadi, har xil ismli zaryadlar esa – imkon qadar bir-biriga yaqin joylashadi.

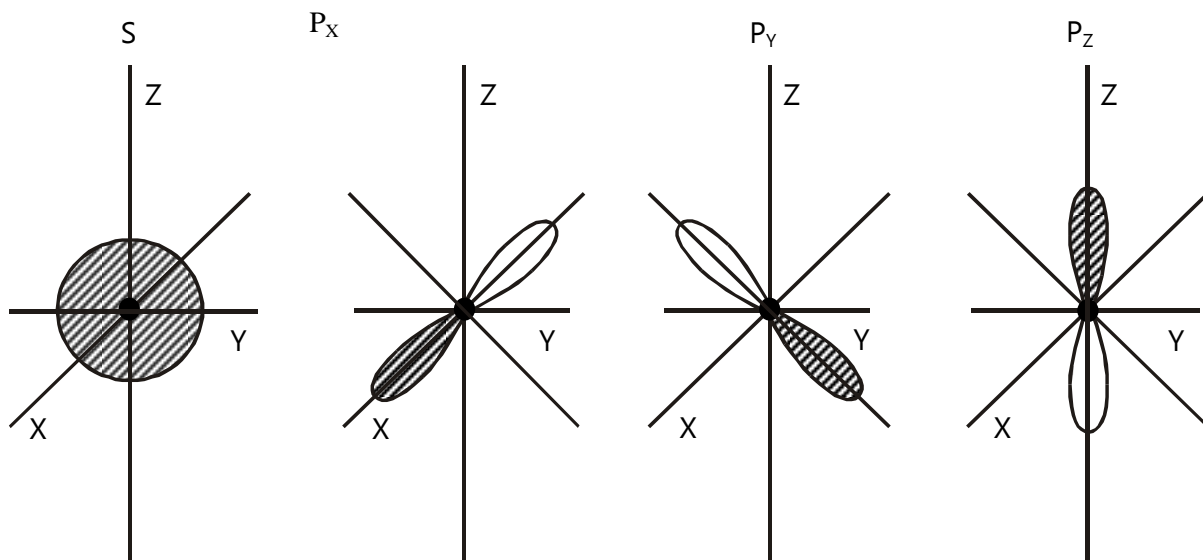
4.2. Metall bog'lanishining kristall tuzilishiga bog'liqligi.

Metall bog'lanishlarda elektronlar umumlashgan bo'lgani uchun unda barcha atomlar taxminan bir xil sharoitga ega bo'ladi. Bunday atomlarning joylashishini bir-biriga juda zich joylashtirilgan 12 ta qo'shniga ega bo'lgan sharlar deb qarash

mumkin. Bunday tipdagi bog'lanishga juda zich joylashgan kubik yoki geksagonal panjaralar mos keladi.

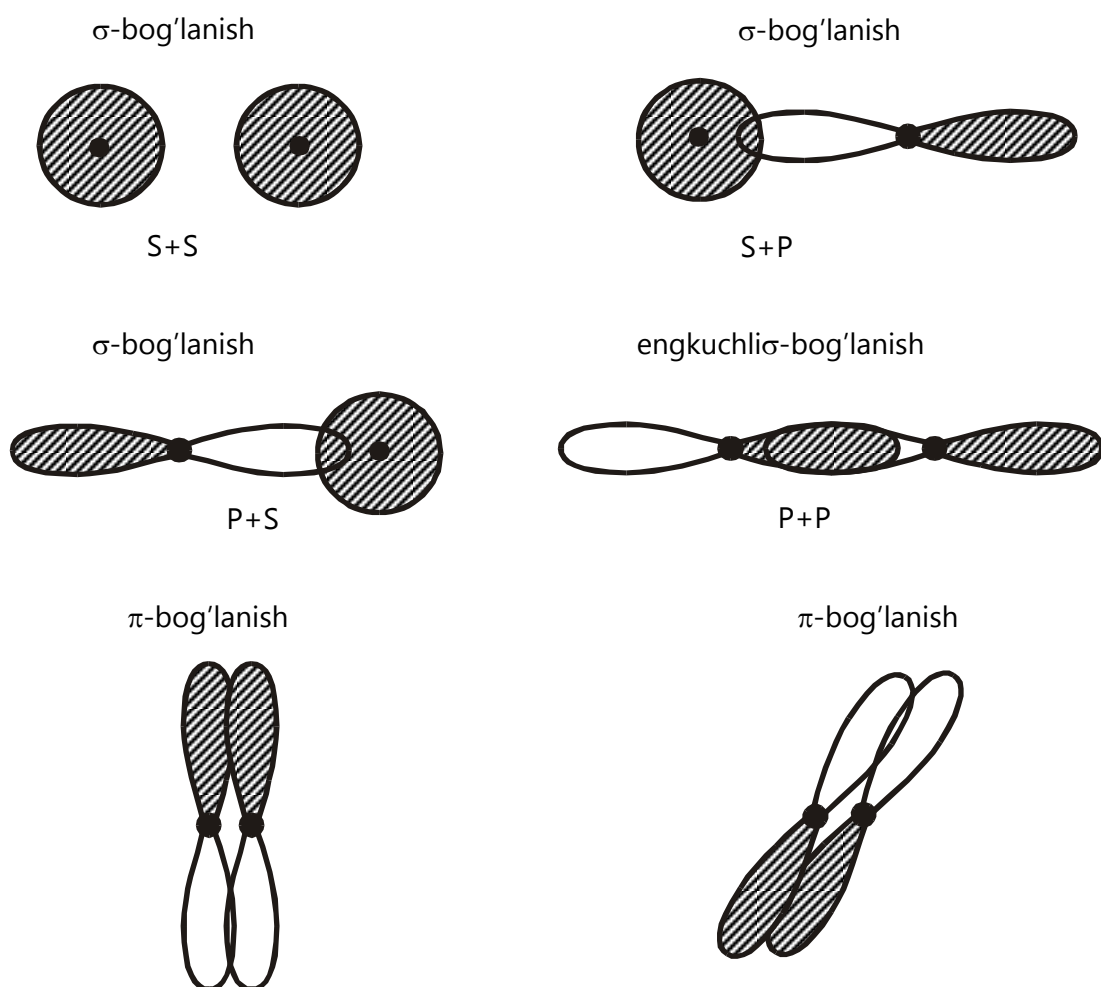
4.3. Kovalent bog'lanishdagi σ va π bog'lanishlar.

Kovalent bog'lanishli kristallarda kristallning tuzilishi kovalent bog'lanishning tipiga bog'liq bo'ladi. Kovalent bog'lanish hosil qiladigan elektronlar bog'lanish ro'y berishidan oldin yoki bog'lanish paytida o'z orbitalarida ma'lum bir yo'nalish bo'yicha orientirlangan bo'ladi. Umuman, kovalent bog'lanishlarda asosan S yoki P elektron ishtirok etadi. Bu erdagi kovalent bog'lanishlar 2 xil tipda bo'ladi: σ - va π - bog'lanishlar. S va P orbitallarning har xil o'qlar bo'ylab yo'nalishi 5-rasmda tasvirlangan.



5-rasm. Atomning S – va P – orbitallari.

Atomlar bir-biri bilan yaqinlashib bog' hosil qilishida S bilan S , S va P , P va P lar bir-biri bilan qo'shilishib bog'lar hosil qilishi mumkin, bunday bog'lanish hosil bo'lishida yonma-yon turgan atomlar tashqi elektronlarining orbitallari bir-biriga mos tushishi kerak. Mana shunday bog'lanishlarga 6–rasmda misollar keltirilgan.



6–rasm. Bog'lanish hosil qilgan orbitallar juftligi.

Bog'lanish hosil bo'lishida yonma-
yon joylashgan atom elektronlarining orbitallari qatnashadi. Demak σ -
bog'lanishlarda ma'lum bir yo'nalishdagi orbitallar bir-biriga qo'shilib ketishi

mumkin ekan; bunda eng kuchli σ - bog'lanish $R + R$ bog'lanishlarga to'g'ri keladi. π - bog'lanishlar asosan R elektronlar orqali amalga oshiriladi; bunda orbitallar bir-biriga parallel joylashgan bo'ladi va elektron orbitallari bir-biriga qismangina qo'shilishi mumkin. π - bog'lanish σ - bog'lanishlarga qaraganda juda ham bo'sh bo'ladi.

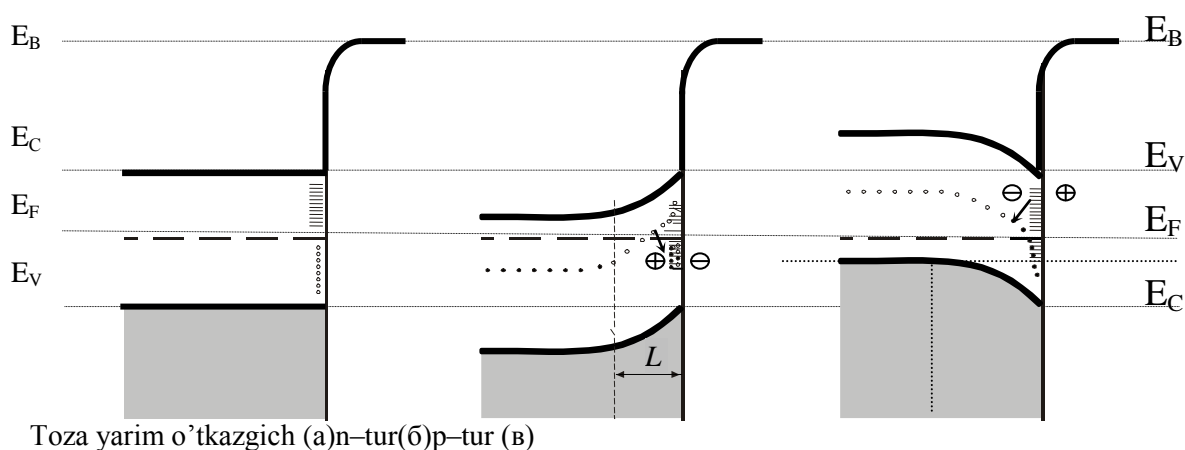
Kovalent bog'lanish asosan qo'shni atomlar orasida ro'y beradi. Kovalent bog'lanish keyingi ikkinchi atom bilan ham ro'y berishi mumkin, ammo bu bog'lanish juda bo'sh bo'ladi. Birinchi qarashda S - va P - tipdagi atom orbitallarining qaysi birlaridan kristallning bog'lovchi va antibog'lovchi orbitallari vujudga kelishini aytish juda qiyin. Si, Ge kabi to'rtinchi guruh elementlaridan tashkil topgan va A_3V_5 , A_2V_6 ikki komponentli yarim o'tkazgichlar uchun sp^3 – ko'rinishidagi gibridlashgan orbitallar eng qulay kombinastiya ekanligi aniqlangan. Si va Ge guruhi uchun to'rtta yaqin qo'shniga ega bo'lgan kristall tuzilish xarakterlidir. Bunda qo'shni atomlar tetraedrning uchlariga, qaralayotgan atom uning markaziga joylashadi. Bunda barcha sp^3 – orbitallar σ - tipdagi bog'lovchi va antibog'lovchi orbitallarni tashkil qilishda qatnashadi. Har bir juft atomga 4 ta bog'lovchi va 4 ta antibog'lovchi orbitallar to'g'ri keladi. Barcha 8 ta elektronlar 4 ta bog'lovchi orbitallarga joylashsa, antibog'lovchi orbitallar bo'sh qoladi. Atomlarning bunday joylashish konfigurastiyasi "olmoc" tipidagi tuzilish deyiladi.

3.4. Yarimo'tkazgichlaryuzasiningrealholdagienergetiktuzilishi

Real holdagi yarim o'tkazgichning yuzasi juda murakkab kristall tuzilishiga ega, shuningdek murakkab elektron tuzilishga ega bo'ladi. Real kristallarning elektron tuzilishi haqida umumiy mulohazalarga suyangan holda ayrim ma'lumotlarni berish mumkin bo'ladi.

Har qanday kristallning energetik holatini tasvirlashda "har qanday sharoitda (aralashma qo'shilsa, boshqa modda bilan birikma hosil qilsa va hokazo) ham

ularning Fermi sathlari o'z joyini o'zgartirmaydi" degan tushunchaga asoslanish kerak. Bizga ma'lumki, eng tashqi, ya'ni yuzadagi atomlarning, masalan kremniy atomlarining bittadan elektronlari bog'lanmagan holda bo'ladi, ular neytrallanishi uchun bu atomlar bittadan elektron qabul qilib olishlari kerak. Yuzadagi har bir atomning bittadan bo'sh elektroni bor bo'lgani uchun yuzaga tegishli yangi sathlar hosil bo'ladi. Bu sathlar Tamm sathlari deyiladi (yoki "adashgan atomlar sathlari" deyiladi). Toza yarim o'tkazgichda Tamm sathlarining yarmisi elektronlar bilan to'la, yarmisi bo'sh bo'ladi (7 – rasm).



7–rasm. Toza va aralashmali yarim o'tkazgichning tuzilishi.

n – tip yarim o'tkazgichda ortiqcha va oson harakat qila oladigan elektronlar mavjud bo'lganligi uchun bu elektronlar yuzadagi Tamm sathlarini to'ldira boshlaydi. Natijada kristallning yuza qismi manfiy, yuza osti qismi esa musbat zaryadlanadi va donor elektronlarning yuzaga o'tishi qiyinlasha boradi; bu esa zona chegaralarining egilishiga olib keladi. Egilish qismining kengligi donor elektronlarining konstentrastiyasiga bog'liq bo'ladi. Donor elektronlarining konstentrastiyasi qancha katta bo'lsa, egilish kengligi L shuncha qisqa bo'ladi; chunki bu elektronlar qancha ko'p bo'lsa, shuncha tez va qisqa masofada

Tammning bo'sh sathlarini to'ldirishga ulguradi (16, b – rasm). r – tip yarim o'tkazgichda ortiqcha teshiklar mavjud bo'lganligi uchun ular Tamm sathlaridagi elektronlarni o'ziga qabul qila boshlaydi. Yuza musbat yuza osti esa manfiy zaryadlanib qoladi (16, v – rasm).

Shunday qilib yuzada zonalar egilishining vujudga kelishi yarim o'tkazgich n – tip bo'lsa, elektronlarning chiqish ishini kattalashtiradi, r – tip bo'lsa – kamaytiradi. Rasmdan ko'rinadiki, yarim o'tkazgichlarda termoelektron chiqish ishi sirtidagi (yuzadagi) Fermi sathining holati bilan aniqlanadi va uning qiymati yarim o'tkazgichga qanday aralashma kiritilishidan qat'iy nazar (p – tipdan n – tipga o'tsa ham) deyarli o'zgarmaydi, hamda quyidagi formula bilan aniqlanadi:

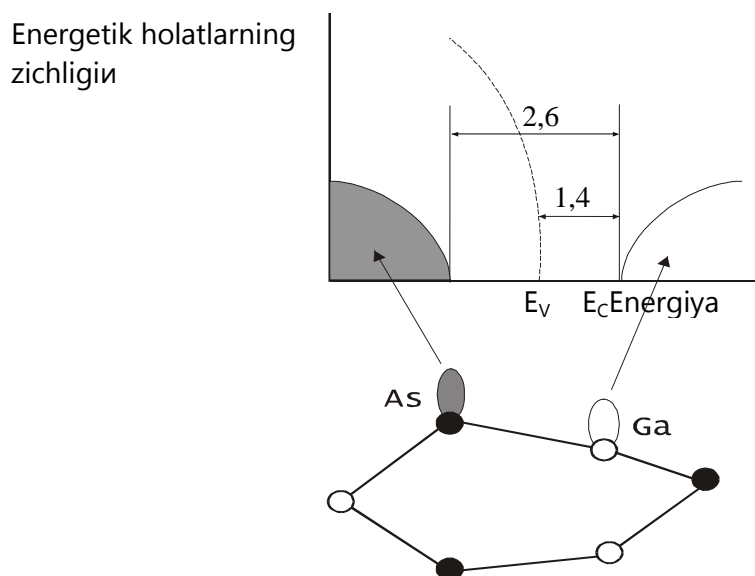
$$\varphi \cong \chi + \frac{1}{2} E_g \quad (9)$$

Bu yarim o'tkazgichlarning yuzasida Fermi sathi holati o'zgarmaydi, ammo xajmdagi Fermi sathi o'zgaradi. Bunday yarim o'tkazgichlar yuzasidagi Fermi sathining holati fiksastiyalangan (muvofiqlashgan) yarim o'tkazgichlar deb ataladi: agar u elektronli (donorli, ya'ni n – tip) yarim o'tkazgich bo'lsa, uning yuzasi har doim «manfiy», agar kovakli (akseptorli, ya'ni r – tip) bo'lsa – «musbat» zaryadlanadi.

Ko'rib o'tilgan yarim o'tkazgichlarda fotoelektronlarning chiqish ishi (valent zonasining eng yuqori sathidan hisoblanganda) aralashmaning turiga qarab sezilarli darajada o'zgaradi. Bu o'zgarishning eng maksimal qiymati yarim o'tkazgichning taqiqlangan zonasi kengligiga yaqin bo'ladi (masalan, Si uchun ~1 eV, GaAs uchun ~1,4 eV).

Agar yarim o'tkazgich yuzasida zonalar egilishi yo'q deb faraz qilinsa, Fermi sathi fiksastiyalanmagan bo'ladi. Bunda yarim o'tkazgich n – tipdan r – tipga o'tganda (yoki aksi) fotoelektronlar chiqish ishi o'zgarmaydi va aksincha termoelektronlar chiqish ishi o'zgaradi. Ammo deyarli hamma yarim o'tkazgichlarda (ayrim ion bog'lanishli birikmalardan tashqari) zonalar egilishi kuzatiladi.

Zonalar chegaralarining egilishi toza va aralashmali kremniyda yaqqol ko'rinadi. GaAs va GaP kabi ikki komponentli yarim o'tkazgichlarda yuzadagi atomlarning joylashishi hajmdagi joylashishga juda yaqin bo'ladi, ya'ni 1×1 tuzilish hosil bo'ladi. Ammo real holda hattoki qisman ion bog'lanishga ega bo'lgan kristallarda ham ma'lum bir miqdorda relaksastiya yoki rekonstruktsiya ro'y beradi. Natijada yuzada bitta qatorda turishi kerak bo'lgan atomlar bir oz siljiydi (17–rasm). Tajribalarning ko'rsatishicha siljish natijasida hosil bo'lgan burchak – $\varphi \approx 25 \div 30^\circ$ atrofida bo'lishi mumkin. Natijada GaAs ning yuzasi qismidagi elektron tuzilish hajmnikidan sezilarli farq qiladi. Bu farq 8–rasmda aks ettirilgan.



8–rasm. GaAs (110) ning relaksastiyalangan yuzasi elektron va fazoviy tuzilishining sxematik tasviri.

Ideal holda hajm uchun taqiqlangan zonaning (E_v va E_c orasidagi masofa) kengligi 1,4 eV ni tashkil etadi. Yuzadagi atomlarning hosil qiladigan energetik sathlarining tuzilishi hajmnikidan farq qiladi. O'tkazilgan tajribalar ko'rsatadiki, bu farq asosan Tamm sathlari (bog'larning uzilishi tufayli hosil bo'ladigan

sathlar) tufayli vujudga keladi. Bunda mishyak atomlari Ga dan elektron qabul qilib olib, valent zonaning ichkarirog'iga joylashgan to'la sathlarni vujudga keltiradi. Ga atomlari esa elektronlarini bergani uchun o'tkazuvchanlik zonasida bo'sh sathlar hosil qiladi. Yuzaga tegishli bo'lgan to'la va bo'sh sathlar orasidagi masofa, ya'ni taqiqlangan zona kengligi 2,6 eV ni tashkil qiladi.

X U L O S A

Bizga ma'lumki qattiq jismning deyarli barcha fizik xususiyatlari, hattoki ayrim mexanik xossalari va ko'pgina kimyoviy xossalari uning yuzasining holati bilan aniqlanishi tajribada isbotlangan. Shuning uchun ham 1970 yillardan boshlab yuzalarni tadqiq qilish va uni o'rganish uchun yangi maxsus usullar ishlab chiqishga juda katta ahamiyat berila boshladi.

Jismning yuza qatlamlari alohida, o'ziga xos bo'lgan murakkab xususiyatlarga ega bo'lib, ular hajmiy xususiyatlardan keskin farq qiladi. Bunday farqlarning juda ko'p sabablari bor. Hattoki, ideal holgacha tozalangan va bir xil tarkibli kristallarda ham yuza va hajm xususiyatlari farq qiladi. Chunki, masalan, hajmda joylashgan atomlar o'zining to'rt tarafidan atomlar bilan bog'langan bo'lsa, yuzadagi atomlar faqat uchta tomondan bog'lanib, tepada atomlar yo'q bo'lganligi uchun to'rtinchi tomondan bog'lanmagan bo'ladi. Qattiq jismlarni, o'zlaridagi atomlarning, molekulalarning yoki ionlarning o'zaro joylashish tartibiga qarab kristallarga va amorf jismlarga ajratadi. Ulardagiasosiytafovut – fazodajoylashganzarrachalariningtartiblilikdarajasidir. Amorfjismlardafaqatyaqin, tartibbor, ya'niengyaqinqo'shniatomlarningjoylashishidama'lumqonuniyatmavjud.

Kristalljismlaryaqinvauzoqtartibmavjudligibilanxarakterlanadi, ya'niundagibarchaatomlaraniqbirtartib .ilanjoylashib, ma'lumbirfazoviy strukturanihosilqiladi. Kristallvaamorfjismlar strukturasiidagitafovutularidagifizikxususiyatlarningharxilbo'lishiga sababbo'ladi. Jumladan, kristallardamexanik, optik, elektrvaboshqako'pginafizikxossalarianizatropdir, ya'nibuxossalarkristallarningharxilyo'nalishlaridaturlichanomoyonbo'ladi.Sh

uningdek qattiq jismlardagi dislokastiyalarning kinetika sinio'rganishasosida o'ta mustahkam materiallar hosil qilinadi.

Kovalent bog'lanishli kristallarda kristallning tuzilishi kovalent bog'lanishning tipiga bog'liq bo'ladi. Umuman, kovalent bog'lanishlarda asosan S yoki P elektron ishtirok etadi. Bu erdagi kovalent bog'lanishlar 2 xil tipda bo'ladi. Bog'lanish hosil bo'lishida yonma-yon joylashgan atom elektronlarining orbitallari qatnashadi. Demak σ - bog'lanishlarda ma'lum bir yo'nalishdagi orbitallar bir-biriga qo'shib ketishi mumkin ekan; bunda eng kuchli σ - bog'lanish $R + R$ bog'lanishlarga to'g'ri keladi. π - bog'lanishlar asosan R elektronlar orqali amalga oshiriladi; bunda orbitallar bir-biriga parallel joylashgan bo'ladi va elektron orbitallari bir-biriga qismangina qo'shilishi mumkin. π - bog'lanish σ - bog'lanishlarga qaraganda juda ham bo'sh bo'ladi.

Kovalent bog'lanish asosan qo'shni atomlar orasida ro'y beradi. Kovalent bog'lanish keyingi ikkinchi atom bilan ham ro'y berishi mumkin, ammo bu bog'lanish juda bo'sh bo'ladi. Birinchi qarashda S - va P - tipdagi atom orbitallarining qaysi birlaridan kristallning bog'lovchi va antibog'lovchi orbitallari vujudga kelishini aytish juda qiyin. Si, Ge kabi to'rtinchi guruh elementlaridan tashkil topgan va A_3V_5 , A_2V_6 ikki komponentli yarim o'tkazgichlar uchun sp^3 - ko'rinishidagi gibridlashgan orbitallar eng qulay kombinastiya ekanligi aniqlangan. Si va Ge guruhi uchun to'rtta yaqin qo'shniga ega bo'lgan kristall tuzilish xarakterlidir. Bunda qo'shni atomlar tetraedrning uchlariga, qaralayotgan atom uning markaziga joylashadi. Bunda barcha sp^3 - orbitallar σ - tipdagi bog'lovchi va antibog'lovchi orbitallarni tashkil qilishda qatnashadi. Har bir juft atomga 4 ta bog'lovchi va 4 ta antibog'lovchi orbitallar to'g'ri keladi. Barcha 8 ta elektronlar 4 ta bog'lovchi orbitallarga joylashsa, antibog'lovchi orbitallar bo'sh qoladi.

Shunday qilib yuzadagi kristall tuzilish yoki panjara parametrlari hajmnikidan farq qilar ekan. Bu esa o'z navbatida hajm va yuza elektron tuzilishlarining bir-biridan farq qilishiga olib keladi. Yuza qatlamlarga tashqi

ta'sir ko'rsatib, uning xususiyatlarini kerakli yo'nalishda o'zgartirish mumkin. Buning uchun ionlar implantastiyasi, lazer va boshqa nurlar bilan ishlov berish, aktiv element atomlari va molekulalar o'tkazish va boshqa usullardan foydalanilar ekan. GaAs (110) kristaliyuzaqismidagi uchta qatlamda atomlarning joylashish real holda masalan Ga atomlari o'z qatoridan ma'lum birmasofa siljigan bo'ladi. Bubog'lanishlar qisman ionli bo'lganligi uchun juda kuchli bo'ladi. Shuning uchun ham ko'phollardak kristall panjaraning kuchli rekonstruktsiyasi ro'y bermaydi. Ammo o'zroq bo'lsaham relaksatsiyavarekonstruktsiyaning mavjudligi GaAs yuzaqism elektron tuzilishining "hajmiy" elektron tuzilishidan farqqilishiga olib keladi. Metall bog'lanishlarda elektronlar umumlashgan bo'lganligi uchun unda barcha atomlari taxminan bir xil sharoitga ega bo'ladi. Bunday atomlarning joylashishini bir-biriga juda zich joylashtirilgan 12 taqo'shniga ega bo'lgan sharlar deb qarash mumkin. Bunday tipdagi bog'lanishga juda zich joylashgan kubik yoki geksagonal panjaralar mos keladi.

Savollar:

1. Kristallardagi atomlarning qanday bog'lanish turlari mavjud?
2. Ionlibog'lanishnima?
3. Metall bog'lanishning xarakterli jihatlarini tushuntiring.
4. Kovalentbog'lanishnitushuntiribbering.
5. Ionlashishdarajasinima?
6. Polingformulasiniyozibbering.
7. Kationdan anionga o'tadigan zaryad miqdori qanday topiladi?
8. Ionlashish darajasini tajribada qanday aniqlash mumkin?
9. Modelung energiyasi deb nimaga aytiladi?
10. Metall bog'lanishda atomlar qanday joylashadi?
11. Kovalent bog'lanish qanday bog'lar hisobiga mavjud bo'ladi?
12. Kovalent bog'lanishda asosan qanday elektronlar ishtirok etadi?
13. S - va P - orbitallar koordinata o'qlari bo'yicha qanday joylashadi?
14. σ - va π - bog'lanishlarnitushuntiribbering.
15. $S + S$, $S + P$, $P + S$, $P + P$ bog'lanishlarning sxematik tasvirini chizing.
16. Bog'lovchi va antibog'lovchi orbitallar nima?
17. Tamm sathlari deganda nimani tushunasiz?
18. Aralashmali yarim o'tkazgichlarda zonalar chegaralarining egilish sabablarini tushuntiring.
19. Egilish kengligi nima va nimalarga bog'liq?
20. Zonalarning egilish jarayonida p – va n – tip yarim o'tkazgichlarda yuza va yuzaning pastki qismi qanday zaryadlanadi?
21. Energetik zonalarning egilish ro'y bergan paytidagi diagrammasini chizing va tushuntiring.
22. GaAs ning relaksastiyalangan yuzasi uchun elektron va fazoviy tuzilish shaklini chizing.
23. Yuzasida Fermi sathi fiksastiyalangan yarim o'tkazgich deb nimaga aytiladi?
24. Rekonstrukstiyavarelaksastiyanima?

ADABIYOTLAR

1. Umirzakov B.E., Tashmuxeimedova D.A. Qattiq jism yuzalarini o'rganish usullari: O'quv qo'llanma. –ToshDTU, 2005. –63b.
2. Нормурадов М.Т., Умирзаков Б.Е. Энергетические спектры поверхности твердых тел, имплантированных ионами низких энергий. – Т.: Фан, 1989. –158с.
3. Кремков М.В., Беседина Е.А. Диагностика поверхности материалов. – Т.: Фан. 1986, –100с.
4. Шульман А.Р., Фридрихов С.А. Вторично-эмиссионные методы исследования твердого тела. –М.: Наука, 1977. 552с.
5. Нормурадов М.Т., Умирзаков Б.Е., Ражаббоев Р.Р. Қаттиқ жисм сиртларининг иккиламчи электрон спектроскопияси: Ўқув қўлланма. – Т.: Конструктор, 1993. –66б.
6. Касымов А.Х. Электрониканинг физикавий асослари: Ўқув қўлланма. – Т.: Фан, 1997. –186б.
7. www.ioffe.rssi.ru/journals/ftt/
8. www.issp.ac.ru/journal/surface/