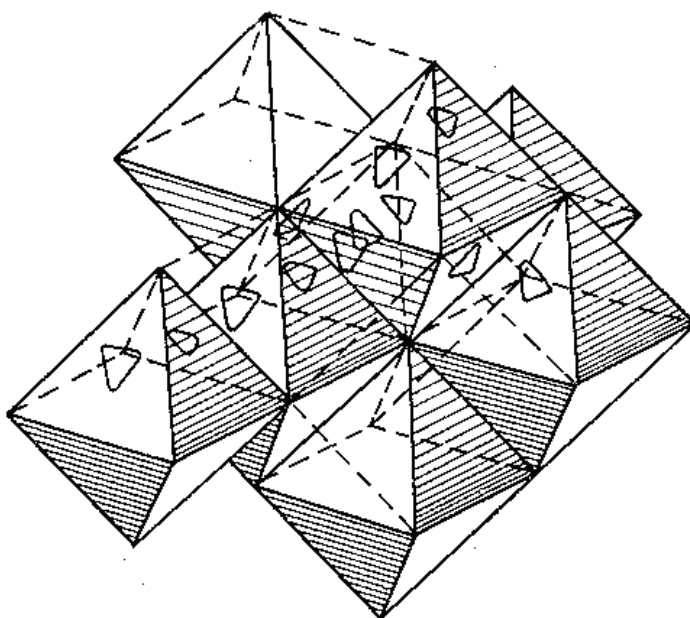


ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

Зайнобидинов Сирожиддин, Йўлчиев Шахриёр Хусанович,
Носиров Мурод Зокирович

Яримўтказгичларда атомлар диффузияси



5A440103–”Яримўтказгичлар ва диэлектриклар
физикаси”,

5A440111–”Қаттиқ жисм физикаси”
мутахассисликлари ҳамда

5440100-“Физика” йўналиши талабалари учун

Андижон-2011

С.Зайнобидинов, Ш.Йўлчиев, М.Носиров
Яримўтказгичларда атомлар диффузияси
(ўқув қўлланма)

Ўқув қўлланмада замонавий микроэлектрониканинг асосини ташкил этувчи яримўтказгичларда атомлар диффузиясининг назарий асослари, кристалларнинг тузилиши, улардаги нуқсонлар турлари ва табиати, асосий яримўтказгичли модда – кремнийдаги элементлар диффузияси қонуниятлари ва тажриба натижалари тавсифланган.

Ўқув қўлланма яримўтказгичлар ва диэлектриклар физикаси, қаттиқ жисмлар физикаси, микроэлектроника, электрон асбобсозлик каби махсус курслар дастурлари асосида ёзилди ва шу соҳада таълим олаётган талабалар, магистрлар, аспирантлар, мутахассис ва педагоглар ҳамда кенг жамоатчиликка мўлжалланган.

Тақризчилар: физика-математика фанлари доктори,
профессор М.К.Баҳодирхонов,
физика-математика фанлари доктори,
профессор И.Н.Каримов

Масъул муҳаррир физика-математика фанлари номзоди,
профессор А.Т.Тешабоев

Сўз боши

Техниканинг кўпгина соҳаларидаги (радиоалоқа, телевидение, автоматика, ҳисоблаш техникаси, мудофаа техникаси, космик алоқа ва бошқалар) жадал ривожланишни яримўтказгичлар физикасининг ютуқларисиз, яримўтказгичли асбобларсиз тасаввур қилиш мумкин эмас эди.

Яримўтказгич моддаларга солиштирма қаршилиги жиҳатидан электр токини яхши ўтказувчи ўтказгичлар билан электр токини амалда ўтказмайдиган изоляторлар (диэлектриклар) оралиғини эгаллайдиган моддалар киради.

Яримўтказгичларга Д.И.Менделеевнинг элементлар даврий системасида ихчам группани ташкил этувчи 12 та кимёвий элемент ҳамда кўпгина анорганик ва органик бирикмалар киради.

Яримўтказгич моддалар ва улар асосида тайёрланадиган асбоблар ва қурилмалар тобора кенг кўламда қўлланилмоқда. Бунинг асосий сабаблари яримўтказгич моддаларнинг ажойиб хоссаларидир: яримўтказгичлар турли ташқи таъсирларга жуда сезгир, улар заминида ишлаб чиқарилаётган асбобларнинг ўлчамлари кичик, ишлаш муддати катта ва бажариладиган хизматлар доираси жуда кенг. Шу билан бир вақтда улар турли зарбаларга чидамлидир.

Бинобарин, яримўтказгич моддалар ва асбобларни тадқиқ этиш, уларнинг имкониятларини кенгайтириш ҳамда янги хоссаларини кашф қилиш масалалари ҳозирги замон физика фанида муҳим ўрин тутди.

Улардан оқилона ва самарали фойдалана олиш бугунги кунда ҳар бир ўқимишли ва зиёли инсон учун сув ва ҳаводек зарур бўлиб қолмоқда. Шу нуқтаи назардан қарайдиган бўлсак, яримўтказгичлар, уларда электр токи, яримўтказгичли материаллар ва асбобларнинг ишлаш принципини ўрганиш нақадар долзарб масала эканлиги ўз-ўзидан маълум бўлади.

Яримўтказгич моддалар асосида тайёрланадиган асбоблар, қурилмалар, саноатда, қишлоқ хўжалигида, транспортда, электроникада, микроэлектроникада, компьютерларда, энергияни бир турдан иккинчи турга алмаштиришда, алоқада, информатикада, маиший хизмат соҳасида ва жамият фаолиятининг бошқа барча жабҳаларида турли-туман муҳим вазифаларни бажармоқда.

Мамлакатимизда яримўтказгичли асбоблар физикаси йўналишларида фанлар академияси институтларида, олий ўқув юртлари лабораторияларида жиддий, самарали, илмий–амалий тадқиқотлар жаҳон фани савиясида олиб борилмоқда.

Замонавий электрон асбоблар-интеграл схемалар, микроэлектрон асбоблар яратишнинг асосий технологик базаси-яримўтказгичларни легирлаш усули билан унинг хусусиятларини мақсадга йўналган ҳолда бошқариш, атомлар диффузияси усулида зарурий функционал элементлар ҳосил қилиш муҳим жараёнга айланди.

Нанотехнологияларни тез суръатлар билан электрон асбоблар ишлаб чиқаришга кириб бориши атомлар диффузияси жараёнларини тадқиқ қилишнинг яна ҳам долзарблигини тасдиқлади. Шу муносабат билан яримўтказгичларда атомлар диффузиясини ўрганиш шу куннинг долзарб муаммоси бўлиб қолмоқда.

1-БОБ. ЯРИМЎТКАЗГИЧ КРИСТАЛЛАРДАГИ ТУЗИЛИШ НУҚСОНЛАРИ

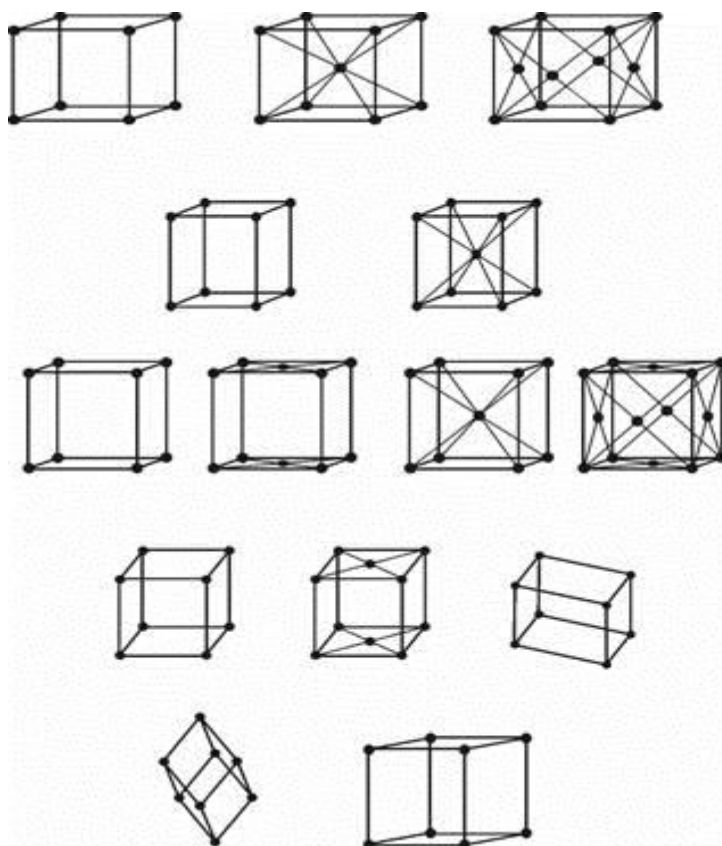
Яримўтказгичлар физикасини ўз таркибига олган қаттиқ жисмлар физикасининг ривожланишида қаттиқ жисмлар тузилиши ҳақидаги модели тасаввурлар катта рол ўйнади. Улар 1912 йилда рентген тузилишининг пайдо бўлиши билан тажрибада ўз тасдиғини топди.

Бу қарашларга асосан, аморф жисмлардан фарқли ўлароқ кристалллар атомлар (ионлар)нинг мунтазам фазовий жойлашиши билан характерланади ва бундай фазовий жойлашиш қаттиқ жисмнинг кристалл панжарасини ҳосил қилади. Бу панжаранинг тугунларида жойлашган атомлар (ионлар) квази эластик кучлари билан боғланган ва ўзларининг мувозанат ҳолати атрофида тинимсиз тебраниб туради.

Кристалл панжарани ўрганиш учун кристалл симметриясининг барча хоссаларини сақловчи энг кичик элементар ячейкадаги атомларнинг жойлашишини билиш кифоя. Ҳар бир кристаллни айнан ўхшаш элементар катаклардан иборат уч ўлчамли жисм сифатида кўриб чиқиш мумкин.

Кристалл панжаранинг фазовий симметрия масалалари замонавий кристаллографиянинг муҳим таркибий қисми ҳисобланади ва қаттиқ жисмларнинг таркибий таҳлили асосида ётади. Геометрик жиҳатдан мумкин бўлган 14 турдаги фазовий панжара мавжуд. Бу панжараларни Браве панжаралари деб аташ қабул қилинган бўлиб, улар бир текисликда ётмаган, бир нуқтадан чиқувчи бирлик $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ векторлар асосида тузилади. Бу векторларнинг катталиги ва ўзаро йўналишига қараб бир-биридан ўз симметрияси билан фарқ қилувчи Бравенинг 14 панжараси ҳосил бўлади (1-расм).

Бундай идеаллаштирилган тасаввурлар кристаллларнинг бир қатор хоссаларини, электронлар ва рентген нурларининг дифракцияси, пьезоэлектрик товуш тарқалиши, иссиқлик сиғими, оптик хоссалар ва бошқаларни тушунтиришда ғоятда қўл келди. Бу тушунчалардан кристалларда электронларнинг энергетик спектрини тушунтириш учун квант механикасида самарали фойдаланилди.



1-расм. Браве бўйича асосий кристаллографик панжаралар энг кичик катаклари.

Аммо, кристалнинг идеал тузилиши ҳақидаги тасаввурлар тажрибада кузатиладиган айрим муҳим ҳодисаларни тушунтириб бера олмас эди. Шу боисдан ҳақиқий кристаллар тузилиши назарий ва амалий жиҳатдан тадқиқланиб, уларда қатъий даврийликдан четланишлар-тузилиш нуқсонлари мавжуд бўлишлиги аниқланди.

1.1. Нуқсонлар турлари

Хақиқий кристаллар идеаллаштирилган моделдан, авваламбор, қаттиқ жисмнинг кристалл панжарасида атомларнинг даврий жойлашувида кўпгина бузилишлар билан фарқ қилади. Бу бузилишларни тузилиш нуқсонларининг геометрик белгилари бўйича 4 та синфга бўлиш мумкин:

- 1) нуқтавий (ноль ўлчамли),
- 2) чизигий (бир ўлчамли),
- 3) ясси (икки ўлчамли),
- 4) хажмий (уч ўлчамли) нуқсонлар.

Нуқтавий нуқсонларга кристалл панжаранинг бўш тугунлари ва тугунлараро атомлар, кристалга кириб қолган бегона атомлар, рангдорлик марказлари, шунингдек, бу нуқсонларнинг бирикмалари киради.

Нуқтавий нуқсонлар – тузилиш нуқсонлари ичида энг кенг тарқалгани ҳисобланиб, қизиш (иссиқлик нуқсонлари), тез заррачалар билан нурланиш (радиацион нуқсонлар), кимёвий бирикмалар таркибида стехиометриядан оғишлар (стехиометрик нуқсонлар), киритилган ёки назоратга олиб бўлмайдиган киришмалар борлиги туфайли вужудга келади.

Чизигий нуқсонлар дислокациялардир. Ясси нуқсонларга кристаллнинг доначалари ва эгизаклари чегараси, тахланиш нуқсонлари, фазалар аро чегаралар ва кристалл чегаралари киради. Хажмий нуқсонларга бошқа фаза кириндилари ва микробўшлиқлар киради. Улар, одатда, кристалл ўстириляётган суюлмада катта миқдорда киришмалар, ифлосликлар мавжудлигидан ёки ўта тўйинган қаттиқ эритманинг кейинги парчаланишидан ҳосил бўлади.

Икки ўлчамли нуқсонлар шунингдек, суюлмада киришмалар мавжудлиги натижасида ҳам ҳосил бўлиши мумкин. Аммо, кўпинча улар кристалл ўсиши режими хоссалари туфайли ҳосил бўлади.

Чизигий нуқсонлар – дислокацияларнинг пайдо бўлиш сабаби бўлиб, ўсиш жараёнида кристалда ҳосил бўлувчи ёки кейинги технологик жараёнларда юзага келувчи нуқсонлар ҳисобланади.

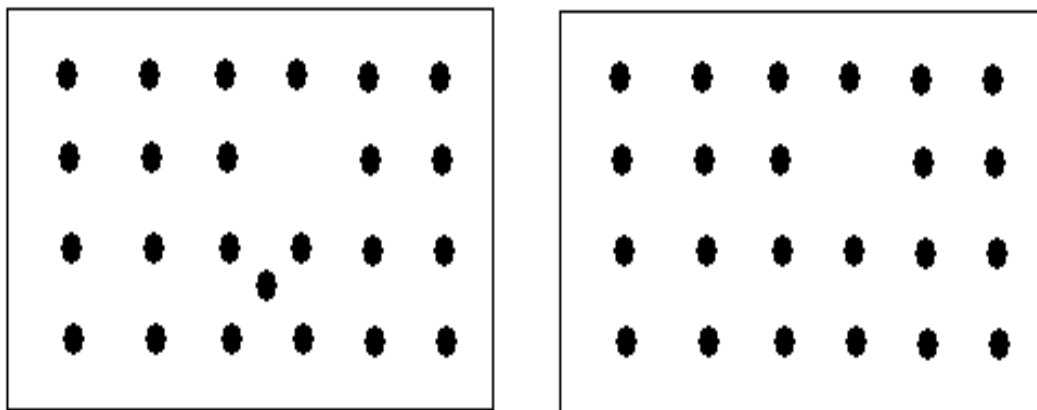
1.2. Термодинамик мувозанатдаги нуқтавий нуқсонлар

Кристални нурлаш, унга киришмаларни киритиш, деформациялар ва х.к.лар билан боғлиқ равишда пайдо бўлувчи, бошқа нуқтавий нуқсонлардан фарқли равишда, кристалларда спонтан (ўз-ўзидан) равишда нуқсонларнинг термодинамик мувозанат ҳолатларида катта миқдорда қаттиқ жисмнинг табиий кристаллик ҳолатида юзага келиши мумкин. Шунинг учун улар доимо ҳар қандай кристалларда мавжуддир. Кристалларда иссиқлик нуқсонларининг ҳосил бўлиш механизми Я.И.Френкель томонидан ўрганиб чиқилган. У баён этган маълумотлар куйида келтирилган бўлиб, етарли даражада содда ва кўргазмалидир. Физикада сублимация-қаттиқ жисмларнинг буғланиш ҳодисаси яхши маълум. Қаттиқ жисм устида, худди суюқликдагидек, шу модда атомларидан тузилган «буғ» ҳамиша мавжуд. Агар қаттиқ жисм оғзи берк идишга жойлаштирилса, қаттиқ жисм юзасидан буғланувчи буғ босими температура ортиши билан ошиб боришига осон иқроф бўлиш мумкин қаттиқ жисм юза қатламини ташкил этувчи баъзи атомлар, кизитиш жараёнида кристалл юзасидан узилиб, уни ўраб турувчи бўшлиққа ўтиш учун етарли бўлган кинетик энергияга эга бўлиши мумкин. Бу сублимация ҳодисасидир. Аммо, бундай узилишлар фақат юза атомлари учун эмас, балки кристалл ичидаги атомлар учун ҳам ўринли бўлиши мумкин. Дарҳақиқат, статистик физиканинг асосий қонунларидан бири, энергия бўйича заррачалар тақсимланишининг Максвелл қонунига асосан, атомларнинг ўртача кинетик энергияси жуда кам бўлган ҳолатда ҳам, кристалда кинетик энергияси жуда юқори бўлган маълум миқдордаги атомлар бўлади. Бу ҳолатда, ушбу ҳодисанинг эҳтимоллик характериға хос равишда кристалнинг ҳар қандай атоми эртами-кечми ўртача кинетик энергиядан анча кўп бўлган энергияга эга бўлиши мумкин. Бундай атом кристалдаги ўзининг мувозанат ҳолатидан чиқиб кетиши мумкин ва ўзини ўраб турувчи қўшни атомлардан ҳосил бўлган потенциал тўсикни енгиб, қандайдир янги мувозанат ҳолатиға ўтиши мумкин. Бунда у кристалл бўйлаб ҳаракатланиб, ўзининг ортиқча энергиясини қайтиб панжараға (кристалнинг бошқа атомлариға) бериш йўли билан йўкотади. Кристалл ичида «буғланган» атом қаерға кетиши мумкин? Агар панжаранинг барча яқин тугунлари банд бўлса у тугунлар орасиға жойлашиши мумкин.

Кристал ичида атомларнинг «буғланиши» бир вақтнинг ўзида бўш, тўлмаган тугунлар-вакансиялар ҳосил бўлишиға олиб келади.

Кристалардаги тугунлар орасидаги атомлар ва вакансиялар жуфтларидан иборат нуқсонларни Френкель нуқсонлари деб аталади. (2-расм, а)

Френкель нуқсонларидан ташқари кристалларда ёлғиз нуқтавий нуқсонлар—вакансиялар ҳам учрайди, уларни биринчи марта Шоттки кўриб чиққанлиги учун, унинг номи билан аталади. Шоттки нуқсонлари кристалларда атомларнинг зич жойлашиши ҳолатида ўринлидир, бунда атомларнинг тугунлар орасида жойланиши қийин ва энергетик мувозанат нуқтаи жihatдан маъқул эмас. Бундай ҳолда кристалда нуқсоннинг ҳосил бўлиш жараёни қуйидагича кечиши мумкин. Кристалларда сиртий қатламни ҳосил қилувчи алоҳида атомлар бир қисми иссиқлик ҳаракати натижасида қўшни атомлардан узилиб, “янада юзароқ” ҳолатга ўтиши мумкин (2-расм, б).



2-расм. Кристаллардаги нуқсонлар.

а) Френкель, б) Шоттки нуқсонлари

Бу ҳаракатга нисбатдан кам энергия сарф қилиниши боис атомларнинг қисман диссоциация эҳтимоллиги кристалл юзасидан тўлиқ узилиш эҳтимоллигидан юқорилиги ўз-ўзидан кўриниб турибди.

Қисман буғланиш вақтида кристалл юзасида ҳам вакансиялар ҳосил бўлади. Дастлаб бу вакансиялар тўлиқ шаклланмаган, чунки улар устида атомлар йўқ. Кейинчалик улар кристалл хажмига кўчиб у ерда оддий вакансияларга айланади. Шундай қилиб, Френкель нуқсонларидан фарқли ўлароқ Шоттки нуқсонлари кристаллнинг мунтазам панжарасидаги бўш тугунлари сифатида намоён бўладилар.

Френкель Шоттки нуқсонлари фақат қиздирилганда эмас, балки кристалларни нурлантирилганда, пластик деформациялар ва бошқа бир қатор таъсирлар оқибатида ҳам пайдо бўлиши мумкин, аммо уларнинг зичликлари термодинамик мувозанатли эмас (температурага боғлиқ эмас). Шу билан бир вақтда кристалларда иссиқлик нуқсонлари зичлиги доимо температурага боғлиқ бўлиб, температура ортиши билан ортиб боради.

1.3. Радиацион нуқтавий нуқсонлар

Радиацион нуқтавий нуқсонлар кристалларни тез ядровий заррачалар- нейтронлар, дейтронлар, α -заррачалар, ядролар бўлинишида чиққан заррачалар ва тез электронлар билан нурланганда юзага келади. Кристалларни γ -квантлар билан нурлашда юзага келувчи фотон ва электронлар ҳам таркибий нуқсонлар ҳосил бўлишига олиб келиши мумкин.

Радиацион нуқтавий нуқсонлар кристалларда доим жуфт ҳолда-вакансия ва тугунлараро атом (Френкель нуқсонлари) ҳолида учрайди. Юқорида айтиб ўтилганидек, радиацион нуқтавий нуқсонлар иссиқлик нуқсонларидан фарқли равишда термодинамик мувозанатли эмас, нур билан таъсир этиш тўхтаганидан сўнг кристалл ҳолати барқарор эмас.

Кристални нейтрал ва зарядланган тез заррачалар билан нурлантиришда радиацион нуқсонлар ҳосил бўлиш механизмини кўриб чиқамиз. Тез заррачаларнинг кристаллар орқали ўтиши мураккаб жараёнлар билан кечади, жумладан, улар орасида муҳимлари:

- 1) тез заррачаларнинг кристал атомлари ядролари билан эластик тўқнашувлари:
- 2) қўзғалиш ва ионизация – тез заррачалар ёрдамида кристал атомларининг электрон қобикларида жойлашган электронларнинг юқори ҳолатларга ўтиши ва ионланиши;
- 3) ядровий айрилишлар-кристал атомларининг баъзи қисмларини фаоллашуви (уларнинг радиоактив ҳолатга ўтиши), кейин улар радиоактив парчаланишдан киришмавий марказларга айланади.

Умумий ҳолатда бир вақтнинг ўзида барча 3 та жараён кечади. Аммо, атомларнинг кристал панжарадаги боғланиш характери ва нурлантирилаётган кристалнинг бошқа хоссаларига, шунингдек тез заррачаларнинг табиати ва уларнинг энергиясига боғлиқ бўлган айрим ҳолларда бир жараён иккинчисидан устун бўлиши мумкин. Масалан, электронларни юқори ҳолатларга ўтиш ва валент электронларнинг ажралиб кетиши жараёнлари диэлектрик ёки яримўтказгич кристалларда катта роль ўйнайди, металлларда бу жараён деярли сезилмайди. Бошқа томондан, металлларда тез заррачаларнинг эркин электронлар билан ўзаро таъсири устивордир. У металлларда электронларнинг эркин югуриш йўлини камайишига олиб келади.

Биз кўриб чиқаётган нуқтавий радиацион нуқсонлар ҳосил бўлиш жараёни учун тез заррачаларнинг кристал атомлари билан эластик тўқнашувлари кўпроқ аҳамиятлидир. Бу тўқнашувлар қуйидаги эффектларга олиб келади:

1) кристалда эластик тўлқинлар ҳосил бўлади, уларнинг энергияси атомларнинг иссиқлик ҳаракати энергиясига ўтади;

2) таркибий бузилишлари ҳосил бўлади.

Бунинг учун панжара тугунларида жойлашган атомлар, ҳаракат қилаётган заррачадан кристалда нуқсон ҳосил бўлиш энергиясининг чегаравий қиймати U_d юқори бўлган энергияни олиши керак. Тадқиқотларнинг кўрсатишича, U_d атомнинг панжарадаги нормал ҳолатидан тугунлар оралиғига адиабатик ўтишига етарли бўлган энергиядан 2-3 марта юқори бўлиши керак. Чунки бу ҳолатда нуқсон ҳосил бўлиш энергияси $U_d = U_a + U_m + U_{op} + U_{мувоз.}$ дан иборат бўлади. Бунда U_a -атомни адиабатик ўтиш энергияси, U_m -атомни ўз жойидан силжиб кетиш (миграция) энергияси, U_{op} -кристал панжарада вакансияни қайта мувофиқлаштириш энергияси, $U_{мувоз.}$ -силжиган атомни кристалл панжарани бирор жойида мувозанат ҳолатига ўтиш энергияси. Кўпгина кристаллар учун кристалл панжарадаги атомлар боғланиш энергияси тахминан 10 эВ (~231 ккал/моль) бўлади, $U_d \approx 25$ эВ (~580 ккал/моль) га тенг. Тез заррачадан $U \geq U_d$ энергияни олган кристалнинг ҳар бир атоми тугунлар оралиғига силжиши мумкин, бунинг натижасида бир вақтнинг ўзида бўш тугун ва тугунлар оралиғида атомлар вужудга келади. Бунда, агар силжиган атомлар энергияси катталиги (уларни бериш атомлари деб аташ қабул қилинган) U_d дан анча кўп бўлса, унда бу бирламчи атомлар ўз навбатида иккиламчи бериш атомларини, иккиламчилари-учламчи атомларни ва ҳақозо пайдо қилиши мумкин, бу жараён силжиган атомлар энергияси чегаравий атомлар U_d қийматга яқинлашмагунча давом этади.

Кристалларда тез заррларнинг эластик сочилиши, панжарада тузилиш нуқсонларининг пайдо бўлишига олиб келади. Табиийки, бу жараён заррачалар энергиясига боғлиқ бўлиб, унинг ортиши билан сочилиш камайиб боради. Ҳаракатланувчи заррачаларнинг кинетик энергиясини ҳисоблашда қулайлик учун қуйидаги энергетик параметр қабул қилинган.

$$\varepsilon = \frac{m}{M_1} E \quad (I,1)$$

бу ерда M_1 -ҳаракатланаётган заррача массаси, m -электрон массаси, E -унинг кинетик энергияси.

Шундай қилиб, ε параметр тезлиги оғир заррача эга бўлган тезликка тенг бўлган электрон энергиясидир. E параметр етарли даражада катта бўлган ҳолларда, ҳаракатланаётган заррача энергиясининг катта қисми атомларнинг ионланиши учун сарф бўлади ва озгина қисми-эластик тўқнашувларга сарф бўлади. Аммо бу ε параметрдан анча катта бўлган ҳолатларда тўғри, ε_i нometалл диэлектрик ва яримўтказгич кристаллардаги электронларнинг қўзғалиш энергияси. Аммо ε параметр ε_i га нисбатан кичик бўлган

холларда ионланиши ва ўз ўрнидан силжиши тўхтайди, бунда фақат эластик атомларни ва радиацион тўлқинларни юзага келтирувчи эластик тўқнашувлар ўрин эгаллайди.

Эластик тўқнашувларда тез заррачаларнинг таркибий нуқсонларини ҳосил қилиши ва панжаранинг иссиқлик тебранишлари ҳосил қиладиган тўлқинлар вужудга келиши шу заррачалар энергияси ва кристалнинг физик-кимёвий хоссаларига ҳам боғлиқ. Кристалда эластик тўқнашувларда ҳаракатланувчи заррачага энергиясининг йўл бирлигида тўлиқ йўқолиши қуйидагича кўринишга эга:

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

Бу ерда. Z_1 ва Z_2 – ҳаракатланувчи ва тинч турган заррачаларнинг атом номери, N_0 – кристалл хусусий атомлари зичлиги, v -ҳаракатланувчи заррача тезлиги, E -унинг энергияси, e -электрон заряди, M_2 -тинч турган заррача массаси;

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

бунда R -Ридберг доимийси 13,54 эВ га тенг, μ -ҳаракатланувчи ва ҳаракатсиз заррачанинг келтирилган массаси. Бу вақтда, тез заррачанинг кристалл атомлари билан эластик тўқнашувларда нуқсонлар ҳосил бўлишига йўл бирлигида сарфлаган энергияси қуйидагича ифодаланади:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{нук.}} = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4 N_0}{M_2 v^2} \ln \frac{E 4\mu^2}{U_d M_1 M_2} . \quad (I,4)$$

У ҳолда

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{нук.}} / \left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{эл.}} = \ln \left(\frac{E}{U_d} \frac{4\mu^2}{M_1 M_2} \right) / \ln \frac{E}{E^*} \quad (I,5)$$

нисбат ҳаракатланувчи заррачанинг нурлантирилаётган кристалл атомлари билан тўқнашганда тузилиш нуқсонлари ҳосил бўлишига сарф бўлган энергияси бўлагини ифодалайди. Кўп холларда бу нисбат тахминан 0,5 га тенг.

Юқорида айтиб ўтилганидек, тез заррачаларнинг радиацион нуқсон ҳосил бўлиши учун зарур бўлган энергиясининг чегаравий қиймати, кристалнинг физик-кимёвий хоссалари, кристалнинг хусусий атомлари атом оғирликлари билан белгиланади.

1-жадвалда турли атом оғирликларига эга атомлардан тузилган кристаллардаги турли заррачаларнинг радиацион нуқсонларни ҳосил қилиш учун зарур чегаравий энергия миқдорлари келтирилган.

E энергияли ва M_1 массали битта силжиган атом тўқнашиб силжитган атомлари сони N ни баҳолаш учун қуйидаги тақрибий ифодадан фойдаланиш мумкин;

$$N = \frac{1}{U_d} \frac{M_1}{m} \epsilon \left[\ln \left(\frac{E}{U_d} \frac{4\mu^2}{M_1 M_2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \ln \frac{E}{E^*} \quad (I,6)$$

Бу ерда, ϵ - валент электронлар қўзғотиш энергиясининг чегаравий қиймати.

1- Жадвал

Заррачалар	Атом оғирлиги			
	10	50	100	200
Нейтронлар, протонлар, (эВ)	75	325	638	1263
Электронлар, γ -нурлари, (МэВ)	0,10	0,41	0,68	1,10
α -заррачалар, (эВ)	31	91	169	325
Ядро бўлиниш қолдиқлари, (эВ)	85	30	25	27

Кристалларда радиацион нуқсонлар нурлантиришдан ташқари локал иситиш ёки суюлтириш натижасида ҳам юзага келиши мумкинлигини айтиб ўтиш лозим. Локал суюлтириш жойларида 10^3 - 10^4 атомлардан иборат нуқсонлар тўплами юзага келади. Локал суюлтиришда ва кейинги совутишда, нуқтавий нуқсонлардан ташқари, чизигий, ясси ёки хажмий нуқсонлар- дислокациялар, донадорлик чегараси микробўшлик ёки микроёриқ кўринишидаги нуқсонлар юзага келиши мумкин.

1.4. Стехиометрик нуқсонлар

Икки ва ундан ортиқ атомлардан ташкил топган бирикмалар ва мураккаб кристалларда бирорта ташкилловчининг ортиб кетиши ёки камайиши кристалларни ўстириш ва уларни кейинги термик ишловларида стехиометрик нуқсонлар юзага келиши мумкин. Нуқсонли тузилишга эга кимёвий бирикмалардан ташкил топган кристалларнинг каттагина синфи мавжуд, уларда кристалл панжара тугунларининг бир қисми (~30% гача) атомлар билан банд бўлмайди.

Диэлектрик ва яримўтказгич кристаллардаги рангдорлик марказлари ҳам стехиометрик нуқсонларга киради (3-расм). Бундай нуқсонлар, одатда, ион боғланишли икки элементдан ташкилланган бинар бирикма кристалларида пайдо бўлади. Масалан, ишқорий-галоидли кристалларнинг ишқорий кристалл бўғларида қизиши спектрда ўзига хос ёруғлик ютиш оралиғи пайдо қилади, унинг максимуми спектрнинг кўринадиган қисмига тўғри келади. Бундай кристаллар рангли кўринади. (NaCl–сарик рангда, KCl–кўк

рангда ва ҳакозо). Бундай кристалларни кимёвий таҳлилининг кўрсатишича, улар таркибида ҳамиша ишқорий металл атомларининг ортиқча миқдорига эга бўладилар. Баъзи ишқорий-галоид кристаллар уларни галоидларининг атмосферасида қиздирилганда ҳам ўзига хос рангларга эга бўлади.

Na^+	Cl^-	Na^+	Cl^-
Cl^-	Na^+	e	Na^+
Na^+	Cl^-	Na^+	Cl^-
Cl^-	Na^+	Cl^-	Na^+
Na^+	Cl^-	Na^+	Cl^-

3-расм. NaCl да рангдорлик маркази модели.

Ишқорий-галоид кристалларнинг рангдорлиги кристалл электронларининг энергетик спектрларида электронлар (ёки галоидлар атмосферасида қиздиришда-коваклар) билан тўлдирилган локал ҳолатлар пайдо бўлишига боғлиқ. Бундай ҳолатлар ишқорий-галлоид бирикмалар таркибида қайси бир таркибий қисмнинг ортиқлиги ҳисобига стехиометрик таркибдан оғишига асосланади. Бундай вақтда ионли кристалларда, одатда, вакант тугунли тузилишлар ҳосил бўлади, улар тугунлар оралиғида ортиқча ионлар ҳосил бўлган тузилишларга нисбатан энергетик жиҳатдан қулайроқдир.

Демак, ишқорий металл буғларида ишқорий-галоид кристалларни қиздиришда ҳосил бўлувчи рангдорлик маркази моделини галоиднинг вакант тугуни билан ушлаб қолинган локал электрон сифатида тасаввур қилиш мумкин. Худди шунингдек, ишқорий-галоид кристалларни ишқорий металл буғларида қиздириш вақтида ҳосил бўлувчи рангдорлик марказини ишқорий металл вакант тугуни ушлаб қолган ковак сифатида изоҳлаш мумкин. Анион вакансиялар туфайли юзага келувчи рангдорлик марказини V_c^- билан, катион вакансия туфайли юзага келувчи рангдорлик марказини V_c^+ билан белгилаймиз. Рангдорлик марказларига эга кристаллар ҳолатлари энергетик схемаси киришмали яримўтказгичлардаги электронлар ҳолатининг энергетик схемасига ўхшаш (ёки худди ўзи) бўлади.

Рангдорлик маркази туридаги тузилиш нуқсонлари ионли боғланиш характериға эга бинар яримўтказгич бирикмалар кристалларида ҳам мавжуд бўлади. Масалан, ZnO кристаллари вакуумда қиздирилганда, кислород йўқотаётган ҳолатда, сариқ рангга киради. Аммо, кўпчилик яримўтказгич кристалларда ёруғликни ютиш оралиғи максимуми

одатда, спектрнинг кўринмас инфрақизил қисмида ётади. Бундай кристалларда рангдорлик марказларининг мавжудлиги улар рангининг сезилмас ўзгариши билан фақат электрик хоссалари ўзгаришига олиб келади. Бундай яримўтказгич кристалларда рангдорлик марказларининг мавжудлиги уларнинг ранги сезилмас даражада ўзгаргани ҳолда фақат электрик хоссалари ўзгаришига олиб келади. Бундай яримўтказгич кристалл сифатида PbS ни кўриб чиқамиз. Маълумки, PbS кристалларини олтингугурт буғларида қиздириш ковак ўтказувчанликни оширади. Бунда коваклар зичлиги S буғлари босими ортиши билан ошиб боради. Агар қиздиришни етарли сатҳдаги S буғларининг паст босимида ёки вакуумда бажарилса, кристаллар ўтказувчанлиги электрон характерга эга бўлади, электронлар зичлиги эса S буғлари босими пасайиши билан ортиб боради. PbS нинг электрик хоссаларига термик ишловнинг бундай таъсирини бу моддада рангдорлик марказлари пайдо бўлиши билан боғлаш мумкин. Дарҳақиқат, PbS ни олтингугурт буғларида қиздириш катион вакансиялар ҳосил бўлишига, вакуумда эса – анион вакансиялар ҳосил бўлишига олиб келади. Катион ва анион вакансияларда ковак ва электронларнинг жойлашуви V_c^+ ва V_c^- марказларининг ҳосил бўлишига олиб келади.

Тажрибалар кўрсатишича PbS да ҳар бир V_c^+ марказ фақат бир ковакка, V_c^- марказ эса фақат бир электронга эга, PbS икки марта зарядланган Pb^{2+} ва S^{2-} ионлардан иборат эканлигига қарамасдан, таркибий атомнинг валентлиги ва рангдорлик марказ зарядлари ўртасидаги бундай номуносабатлик ионларнинг вакансия яқинида жойлашиш характерига боғлиқ.

Буни V_c^+ турдаги рангдорлик марказлари ҳосил бўлиш мисолида кўриб чиқамиз. Катион вакансиянинг ҳосил бўлиши (Pb^{2+} ионининг кетиши) панжаранинг нейтраллигини бузилиши дегани эмас. Унинг бузилиши қуйидаги йўллар билан юзага келиши мумкин.

1. Катион вакансия яқинида олтингугуртнинг нейтрал атоми ҳосил бўлади, бунда вакансиянинг эффектив заряди нолга тенг. Бундай ҳолатни $[Pb]S$ кўринишда белгилаймиз.

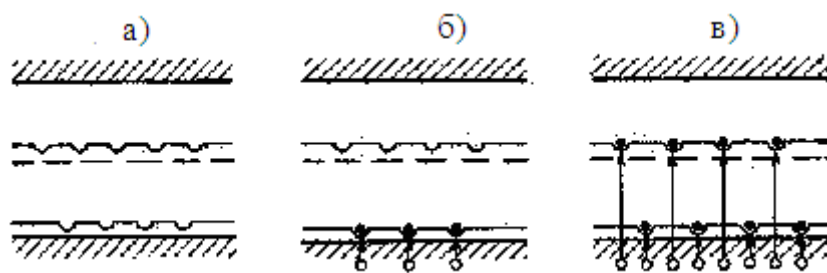
2. Катион вакансия яқинида S^- иони пайдо бўлади, бунда вакансиянинг эффектив заряди +1 га тенг. Бундай ҳолатни $[Pb^+]S$ билан белгилаймиз.

3. Катион вакансия яқинида S^{2-} иони ҳосил бўлади, бунда вакансия эффектив заряди +2 га тенг. Буни $[Pb^{2+}]S^{2-}$ кўринишида белгилаймиз.

Бу ерда мумкин бўлган ҳолат 4-расмда схематик тарзда тасвирланган. Биринчи ҳолат ман қилинган зонада икки эркин сатҳ мавжудлиги (4-расм, а) фақат жуда паст температурада ўринлидир. Ундан юқоридаги бир маромдаги температуралар учун иккинчи

холат амалга ошади, пастки сатҳ электронлар билан тўлдирилади ва валент зонада коваклар ҳосил бўлади (ҳар бир пастки акцептор сатҳга биттадан ковак (4-расм, б га қаранг)). Иккинчи сатҳ тўлдирилиши валент зонада иккита ковак ҳосил бўлиши билан факат юқори температураларда амалга оширилади. Лекин, бундай температураларда электронларнинг валент зонадан ўтказувчанлик зонасига ўтиши ортади, бу холда эҳтимоли бор бўлган учинчи холат сезилмай қолади (4-расм, в). Бу билан, эҳтимол, тажрибада кузатилган ҳар бир катион вакансияга PbS да биттадан ҳаракатчан ковак юзага келиши билан тушунтирилиши мумкин.

Худди шундай холат V_c^- туридаги рангдорлик марказлари ҳосил бўлиши учун ҳам ўринлидир. Бунда ҳар бир V_c^- марказ биттадан электрон манбаи бўлади.



4-расм. Рангдорлик марказининг мумкин бўлган энергетик ҳолати. (PbS га V_c^+)

Оксидлардан ташкил топган кристалларда рангдорлик марказлари кристалларни вакуумда қиздирганда пайдо бўлади. Кислороднинг бир қисми буғланиши ва кислород атомларининг вакант тугунларининг юзага келиши TiO_2 ни оч кўк рангга, ZnO ни сарик рангга киришига сабаб бўлади. Оксидни кислород атмосферасида қиздириш метал панжарасида вакант тугунлар ҳосил бўлишига олиб келиши мумкин, улар ҳам ўз навбатида рангдорлик марказларини ҳосил қилади. Масалан, мис оксидини кислород атмосферасида қиздиришда ўзига хос ёруғликни ютиш оралиғи 0,6 эВ ($\sim 2\text{мк}$) зонасида энг юқори бўлади.

Кристалларда рангдорлик марказлари зичлиги $10^{19} \div 10^{21} \text{см}^{-3}$ га, баъзи кристалларда (CaF_2 , TiO_2 , ZnO ва бошқаларда) – ҳатто 10^{22}см^{-3} га етиши мумкин. Тажриба шароитида рангдорлик марказлари ҳосил бўлиши кристаллар зичлигининг камайишига олиб келиши исботланган [5]. Бу ҳодиса марказлар кристалларда вакансияларнинг ҳосил бўлиши билан боғлиқлигини, аммо, тугунлар оралиғида атомлар пайдо бўлишига боғлиқ эмаслигини кўрсатади.

1.5. Яримўтказгичларда киришмалар

Бегона элементлар атомлари киришмалари–кристаллардаги тузилиш нуқсонлари сифатида кўрилиши лозим. Бегона атомлар кристалл панжаранинг мунтазам тугунларда жойлашиши ва ўринбосар қаттиқ эритмалар ҳосил қилиши мумкин ёки суқилма қаттиқ эритмалар ҳосил қилиб, тугунлар оралиғида жойлашиши ҳам мумкин. Бундан ташқари, улар ўзаро ёки бошқа тузилиш нуқсонлари билан бирикиб турли хил бирикмалар ҳосил қилиши мумкин. Ўринбосар қаттиқ эритмалар ҳосил бўлишининг зарурий шarti бўлиб эритувчи ва эритилган модда (асосий ва киришма) атомлари радиусларининг яқинлиги хизмат қилади. Эритувчи ва эриган моддаларнинг атом радиуслари 14% дан кўпроқ фарқ қилганда ўринбосар қаттиқ эритма ҳосил бўлиш эҳтимоли чекланган бўлиши исботланган. Ва аксинча, атом радиуслари 14% дан камроқ фарқ қилганда ўринбосар қаттиқ эритмалар киритилган ёт табиатли атомлар зичликларининг кенг оралиғида мавжуд бўлишлари мумкин. Бироқ, ўринбосар қаттиқ эритмалар ҳосил бўлиши учун фақатгина яхши геометрик омилнинг ўзи кифоя эмас: эриган элемент ва эритувчининг кристалл тузилишларининг ва атомлар ташқи электрон қобиғининг ўхшашлиги ҳам катта аҳамиятга эга. Санаб ўтилган барча омилларнинг мужассамлиги бир модданинг бошқасида чегараланмаган миқдорда эриши мумкин бўлган ҳолларда қаттиқ эритмаларнинг узлуксиз қатори юзага келишига олиб келади. Табиийки, агар бунда қаттиқ эритма тартибли бўлса, яъни атомларнинг панжарадаги даврий такрорланиши тўғри бўлса, унда бу элементларнинг ҳеч қайсиси киришма сифатида қатнашмайди ва панжарада тузилиш нуқсони сифатида кўринмайди. Суқилма қаттиқ эритмалар ҳосил бўлиши - ўринбосар қаттиқ эритмалар ҳосил бўлишига нисбатан кескинроқ геометрик шарт бажарилишини талаб қилади. Одатда, бу эритмаларни асосий атомларига нисбатан кичик атом радиусларига эга атомлар кристалга кирганда кузатилади. Аммо, яримўтказгичларда кинди ўринбосар ва суқилма қаттиқ эритмалар кўп учрайди. Бундай қаттиқ кинди эритмалар, масалан, мис ва темир гуруҳи элементларини германийга, кремнийга киритилганда ва $A^{III}B^V$ бирикмаларда юзага келади.

Кристалл панжаранинг локал деформацияси киришмалар киритилганда юзага келади ва нуқсон ҳосил бўлиш энергиясининг камайишига олиб келади. Ёт атом ва асосий модда атомлари ўлчамлари ўртасидаги фарқ ортгани сайин нуқсон ҳосил қилиш энергияси камайиб боради. Фридель назарияси бўйича панжарада ёт атом яқинида вакансия ҳосил қилиш энергияси ΔH_8 га камаяди, уни тахминан ушбу ифодадан аниқласа бўлади:

$$\Delta H_8 \approx \frac{6\pi(r_8 - r_8')^2 r_8'}{Z(1+\alpha)\chi'}, \quad (I,7)$$

бу ерда

$$\alpha = \frac{(1+p)\chi}{2(1-p)} \frac{r_8'}{\chi' r_8}. \quad (I,8)$$

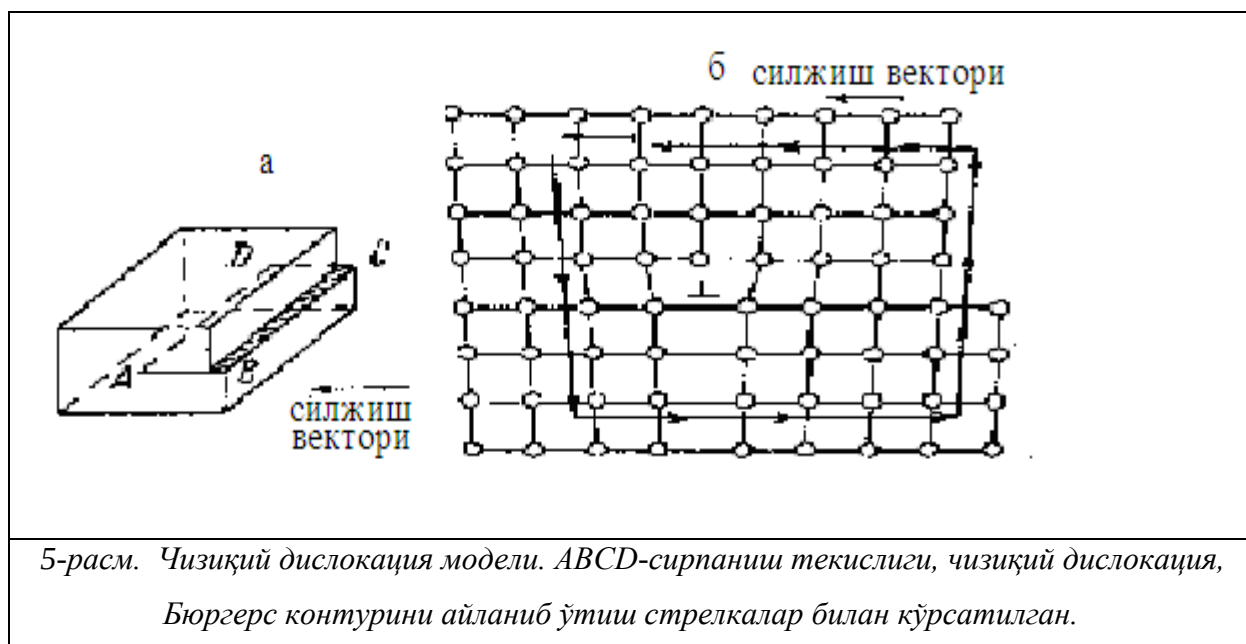
Бунда r_8' ва r_8 - ёт атом ва асосий модда атомининг ионли радиуслари, χ' ва χ – асосий ва эриган модда сиқилувчанлиги. p -асосий модданинг Пуассон коэффиценти, Z -кристалл-эритувчининг координацион сони. Нуқсон ҳосил қилиш энергиясининг камайиши, табиийки, кристалларда термодинамик мувозанат иссиқлик нуқсонларининг зичлиги ортишига олиб келади.

1.6. Дислокациялар

Дислокациялар-кристалл тузилишларининг кўп учраб турувчи номукамаллигидир. Дислокациялар деб ўсиш жараёни ёки пластик деформациялар вақтида кристаллнинг маълум зоналарида вужудга келувчи силжишлар натижасида юзага келувчи кристалл тузилишнинг бузилишига айтилади. Дислокацияларнинг икки асосий кўриниши мавжуд:

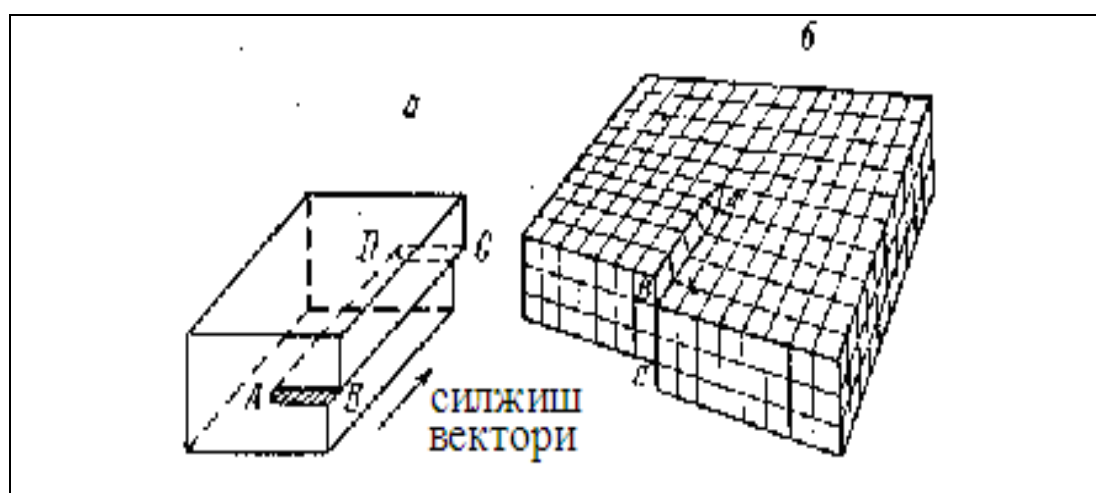
-чизигий,

-винтсимон.



Чизиқий дислокация (5-расм, а) кристалнинг бир зонасининг бошқасига нисбатан силжиши натижасида юзага келиши мумкин, бунда кристалнинг бу зоналарида атом текисликларининг сони 1 га фарқ қилади. Кристалнинг энг кўп бузилган зонаси силжиши текислигида дислокация маркази бўлади. Марказ атрофидан то тўғри тузилиш тикланиш чегарасига бўлган зона-дислокация зонаси деб аталади. Чизиқий дислокациялар силжиш векторига перпендикуляр текисликда, винтсимон дислокациялар шу векторга параллел текисликда ҳосил бўлади. Винтсимон дислокацияларда кристалл бор қалинлиги бўйлаб силжиш вектори томон шундай силжийдики, бунда кристалнинг бу зонасида бир-бирлари устига параллел жойлашиш ўрнига винтсимон зинапояга ўхшаш юза ҳосил қилади.

Кристалл ичида силжиш зонасининг чегараланганлиги боис, дислокациялар берк ҳолатда ёки кристалл чегарасида тугалланган бўлиши керак. Кўпинча дислокациялар кристалл юзасида тугалланади. Шунинг учун тажриба шароитда дислокацияларнинг кристалл юзасига чиқиши жойлари сифатида-едириш шакллари бўлиб кузатилиши мумкин.



Дислокацияларни изохлаш учун Бюргерс вектори $\vec{b}$ киритилган - бу кристалнинг бузилмаган зонасидаги чизигий номукамаллик атрофида жойлашган контурни беркитувчи кесмадир.

Бундай контур Бюргерс контури деб аталади (5-расм, б). Бюргерс векторининг ишораси Бюргерс контури бўйича, айланиб чиқиш йўналишига боғлиқ. Бу эса одатда ўнг винт қоидаси бўйича танланади. Бюргерс вектори панжаранинг трансляцион векторига қаррали. Агар дислокация бир атом текислигини иккинчисига нисбат силжиши натижасида ҳосил бўлган бўлса, Бюргерс вектори силжиш векторига мос келади.

Дислокациялар кристалл бўйлаб силжиши текислигида ёки унга тик равишда ҳаракат қилиши мумкин. Дислокация силжиш текислигида ҳаракатланганда силжиш зонаси ортади ва кристалл пластик равишда деформацияланади. Дислокациянинг тик йўналишдаги ҳаракати-модда ташиб ўтилиши-диффузия билан боғлиқ. Бунда узилган атом текислигининг қайта тикланиши дислокациялашган атом ёки панжаранинг яқин турган тугуни атоми бирикиши йўли билан амалга ошади. Бу ўзига хос атом текислигининг кейинги узилиши четки атомнинг тугунлар оралиғига кетиши ёки унинг яқинида пайдо бўлган вакансия билан рекомбинациялаши йўли билан рўй бериши мумкин.

Дислокациялар кўчиши унча катта бўлмаган энергия сарфини талаб қилади. Температура ортиши билан кўчиш тезлиги кескин ортади, бу эса уларнинг ўзаро йўқ қилинишига (2 қарама-қарши йўналган дислокациялар учрашганда) ёки ягона дислокация ҳосил бўлишига олиб келади. Бунинг натижасида кристалга узоқ даврли иссиқлик ишлови

бериш дислокациялар зичлигини камайтиради ва кристалл тузилишини мукаммаллаштиради.

Кристаллнинг мукамаллик даражаси дислокациялар зичлиги билан характерланади, у кристалл юзаси бирлигидаги едириш чуқурчаларининг сони бўйича аниқланади. Кристаллнинг эгилиши билан дислокация яратишда дислокация зичлиги ρ ва букилиш радиуси r орасида содда муносабат кузатилади:

$$\rho = \frac{1}{rb} \quad (I,9)$$

Дислокациялар мавжудлиги кристаллнинг фақат механик хоссаларигагина эмас, балки уларнинг электрик хоссаларига ҳам, (айниқса, яримўтказгичли кристалларда) таъсир кўрсатади. Дислокацияларнинг яримўтказгичларнинг электрик хоссаларига таъсири қуйидаги омиллар билан белгиланади:

1. Кристалл таркибидаги киришмалар дислокациялар зоналарида панжаранинг потенциал энергияси камайиши натижасида, шу зоналарга ўтадилар (диффузия йўли билан) ва дислокациялар атрофида киришмалар тўпланишини ҳосил қиладилар (киришмали атмосфера). Бу фикр тажриба шароитида мис билан легирилланган кремний кристалларида тасдиқланган. Кремний наъмунасида инфрақизил нурда олинган микро суратлар кўрсатишича, миснинг тўпланиш юзасидаги едириш чуқурчалари олдида тугалланувчи ипсимон йўллар зонасида кузатилади.

2. Узилган текислик чизиғий дислокация чегарасида тўйинмаган боғланишли атомлар занжири мавжудлиги кристаллнинг энергетик спектрида қўшимча локал электрон сатҳлар ҳосил қилади. Германий мисолида бу сатҳлар акцептор бўлади ва улар ман қилинган зонада ўтказувчанлик зона тубидан 0,2 эВ қадар пастда жойлашади.

3. Дислокация борлиги ҳаракатчан ток ташувчилар рекомбинацияси ва сочилиши жараёнларига таъсир қилади. Дислокациялар томонидан сочиш ток ташувчиларининг ҳаракатини камайтиради.

Бироқ дислокацияларнинг одатий зичлигида ($\sim 10^3$ - 10^5 см^{-2}) германийда, масалан, ҳаракатчанликнинг оз камайиши кузатилади (хона зонасида). Дислокациялар рекомбинация жараёнларига ва демакки, номувозанатий ток ташувчилар яшаш вақтига ҳам сезиларли таъсир кўрсатади. Германийда дислокациялар зичлиги ортиши билан чизиғий равишда пасаяди. Шунинг учун, минимал зичликдаги дислокацияли германий, кремний ва бошқа яримўтказгич материалларни олиш яримўтказгич кристалл яратиш техникасидаги долзарб вазифа бўлиб ҳисобланади.

Дислокациялар, шунингдек, яримўтказгичларда киришмаларнинг эрувчанлиги ва диффузия жараёнларига ҳам катта таъсир кўрсатади. Юқорида айтиб ўтилганидек,

дислокациялар киришмаларнинг тўпланиш жойи бўлиб хизмат қилади. Бу айниқса, ҳаракатчан киришмалар (масалан, Cu, Ni германийда, Au ва Si кремнийда ва бошқалар), ҳолида кузатилади, уларнинг кристалдаги боғланиш энергияси, дислокациялардагидан кўра камроқ. Дислокациялар мавжудлиги эрувчанликни оширишини ва бундай киришмаларнинг кристаллардаги диффузия тезлигини камайтиради. Бошқа томондан, дислокациялар шунингдек, вакансиялар манбаи бўлиб ҳам хизмат қилади. Шунинг учун агар киришма диффузияси атомларнинг вакансиялар бўйлаб ҳаракати орқали рўй берса, дислокациялар мавжудлиги диффузия тезлигининг ортишига ҳам олиб келиши мумкин.

Дислокацияларнинг диффузия тезлигига ва киришмалар эрувчанлигига таъсирини ўрганиш яримўтказгич кристалларнинг тузилиш нуқсонлари билан киришмаларнинг ўзаро таъсир механизмини аниқлашда муҳим аҳамиятга эга.

Назорат саволлари

1. Идеал ва реал кристалларнинг асосий фарқлари?
2. Нуқсонларнинг турлари ва пайдо бўлиш сабаблари?
3. Френкель ва Шоттки нуқсонлари?
4. Радиацион нуқсонларнинг пайдо бўлиш механизмлари?
5. Яримўтказгич кристаллардаги бошқа нуқсонлар?

2-БОБ. КРИСТАЛЛАРДА НУҚТАВИЙ НУҚСОНЛАР ТЕРМОДИНАМИКАСИ

2.1 Асосий термодинамик катталиклар

Кристаллардаги нуқтавий нуқсонларнинг мувозанат ҳолатларини таҳлил қилиш учун статистик термодинамиканинг асосий катталиклари ва муносабатлари ишлатилади. Берилган босим (p), ҳажм (V) ва температурада (T) нуқтавий нуқсонларнинг мувозанат концентрацияси Гиббс энергиясининг минимуми орқали аниқланади:

$$G=U-TS+pV \quad (\text{II},1)$$

Бу ерда U -ички энергия, S -энтропия. Ички энергия кристалл тўла энергиясидан кинетик энергиянинг айирмаси орқали аниқланиши мумкин ёки

$$U=\sum N_i U_i \quad (\text{II},2)$$

Бу ерда U_i –ҳар бир зарранинг энергияси, N_i - U_i энергияга эга бўлган зарралар сони.

Нуқтавий нуқсонлар ҳосил бўлиши атомлар (ионлар) жойлашувидаги тартибсизликка олиб келганлиги учун бу жараён энтропиянинг ошишига сабаб бўлади.

$$S=k\ln P \quad (\text{II},3)$$

Бу ерда P - системанинг тенг эҳтимолли ҳолатлари сони. Нуқтавий нуқсонлар назариясида бу энтропияни конфигурацион энтропия деб юритилади, чунки у кристалдаги зарраларнинг қайта тақсимланиши билан боғлиқ. Бу катталик билан бир қаторда термик энтропия тушунчаси ҳам киритилади. У система тебраниш модларининг тенг эҳтимолли ҳолатларини тавсифлаш учун хизмат қилади. Кристални $3N$ та гармоник осцилляторлардан ташкил топган деб фараз қилиб, термик энтропияни

$$S_T=3Nk(1+\ln(kT/h\nu)) \quad (\text{II},4)$$

кўринишда тасаввур қилиш мумкин. Кристалнинг тўла энергияси

$$S=S_T+S_K \quad (\text{II},5)$$

Қаттиқ жисмларда нормал шароитда pV жуда кичик бўлганлиги учун уни ҳисобга олмаслик мумкин. Шунинг учун

$$G=U-TS=F, \quad (\text{II},6)$$

бу ерда F-термодинамик потенциал. Бошқа томондан энтальпия H, ички энергия U, босим ва ҳажм

$$H=U+pV \quad (\text{II},7)$$

ифода орқали боғланган ва pV кичик бўлганлиги учун H кўпинча G га алмаштирилади.

Барча кўриб ўтилган катталиклар шунингдек зарралар сонининг ҳам функциясидир, яъни зарралар сони ўзгарса, бу катталикларнинг барчаси ўзгаради. Шунинг учун N термодинамик потенциалга параметр сифатида боғлиқ:

$$\Phi=N\mu(p, T) \quad (\text{II},8)$$

U ҳолда эркин энергияни қуйидагича ёзиш мумкин

$$G=U-TS+pV+\mu N \quad (\text{II},9)$$

бу ерда μ - химиявий потенциал. Уни G, H, F, S ларни N бўйича дифференциаллаб аниқлаш мумкин. Бунда система бир хил зарралардан тузилган деб фараз қилинади. Агар система бир жинсли бўлмаса, унда химиявий потенциал градиенти юзага келади ва системада мувозанат юз бериши бу градиентнинг йўқолишига олиб келади.

Шундай қилиб, бир жинсли бўлмаган системада химиявий потенциалнинг доимийлиги термодинамик мувозанат шарти бўлиб хизмат қилади. Ҳар хил зарралар (ёки нуқсонлар) бўлган ҳолда ҳар бир тур зарра учун химиявий потенциал киритилади.

Агар қаралаётган система ташқи майдонда жойлаштирилган бўлса, химиявий потенциал қиймати ҳар бир зарра потенциал энергиясига ўзгаради

$$\mu=\mu_0+U \quad (\text{II},10)$$

Мувозанат шарти бутун системада μ нинг доимийлиги бўлади.

Кристаллардаги турли нуқтавий нуқсонлар таъсирлашувчи массалар конунидан келиб чиқувчи термодинамик муносабатлар орқали боғланган

$$aA+bB+\dots \rightarrow lL+mM+\dots \quad (\text{II},11)$$

кўринишидаги реакциялар учун бу қонун

$$\frac{N_L^l N_M^m \dots}{N_A^a N_B^b \dots} = K_l(T) \quad (\text{II},12)$$

кўринишда ёзилиши мумкин. Бу ерда N_A^a - таркибловчилар (нуқсонлар) концентрациялари, $K_l(T)$ - фақат T га боғлиқ ўтиш реакцияси мувозанат доимийси. $K_l(T)$ шунингдек тўғри ва тескари реакциялар тезликлари нисбати орқали аниқланиши мумкин.

$$K_c(T)=K_1/K_2 \quad (\text{II},13)$$

Таъсирлашувчи массалар конуни нуқсонлар концентрацияси кичик бўлганда ва улар ўртасидаги ўзаро таъсир ҳисобга олинмаганда ўринли бўлади. Химиявий термодинамикада бу қонун юқори концентрацияли эритмаларда ҳам қўлланилади, лекин

бунда концентрация ўрнида активлик ишлатилади. Бу ерда активлик деганда қаралаётган таркибловчи босимининг тоза таркибловчи босимига нисбати тушунилади

$$a_i = p_i / p_i^0 \quad (\text{II}, 14)$$

Баъзан активлик коэффициенти ҳам киритилади

$$\gamma = a_i / x_i \quad (\text{II}, 15)$$

бу ерда x_i - таркибловчининг моляр улуши.

Активлик ва активлик коэффициенти нафақат концентрацияни, балки температура ва босимнинг ҳам функциясидир. Улар қаттиқ эритмаларни ўрганишда ҳам киритилиши мумкин.

Шундай қилиб, таъсирлашувчи массалар қонунидан муҳим хулоса келиб чиқади: системанинг мувозанат шароитида бошқа таркибловчилар концентрацияларини ўзгартирмай туриб, битта таркибловчи концентрациясини ўзгартириш мумкин эмас. Бундан химияда кўп компонентли моддалар ёки энергияларини баҳолашда кенг фойдаланилади. Жумладан, бир ячейкадаги зарралар концентрацияни ошириш ҳисобига бошқа ячейкадаги зарралар концентрацияси камаяди.

2.2 Элементар кристалларда Френкель нуксонлари концентрациясига температура таъсири

Кристаллардаги иссиқлик нуксонлари концентрацияси кристалл температураси ва нуксон ҳосил бўлиш энергияси билан аниқланади. Нуксон ҳосил бўлиш энергияси химиявий боғланишлар мустаҳкамлиги яъни боғланиш энергиясига боғлиқ. Шунинг учун кристалдаги нуксонлар концентрациясини температурага боғлиқлигини кўриб чиқамиз. Нуксон ҳосил бўлиш энергиясини Δu билан белгилаймиз, у атомни тугундан тугунлар орасига ўтказиш учун керак бўлган ишни билдиради. 1 см³ да тугунлардаги атомлар сони N , тугунлар орасидаги атомлар сони N' бўлсин деб фараз қилайлик, T температурада n та атом тугундан тугунлар орасига ўтди ва шунча вакансия ҳосил бўлди. Бу жараёнда энтропия ортади. Бу ҳолдаги конфигурацион энтропия

$$\Delta S_k = k(\ln P' + \ln P^*) \quad (\text{II}, 16)$$

Бу ерда P' , P^* - n та қўшимча атомни N' та тугунлар орасидаги атомлар ичига ва n та вакансияни N та тугунларга жойлаштириш усуллари

$$P' = \frac{N!}{(N'-n)! n!} \quad (\text{II}, 17)$$

$$P^* = \frac{N!}{(N-n) \ln n!} \quad (\text{II},18)$$

Бу ифодаларни (II,16) га қўйиб ва Стирлинг формуласидан фойдаланиб

$$\Delta S_k = k \{ [N \ln N - (N-n) \ln(N-n) - n \ln n] + [N' \ln N' - (N'-n) \ln(N'-n) - n \ln n] \} \quad (\text{II},19)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Тўла энтропияни топиш учун бу ифодага ΔS_T ни қўшиш керак.

Атомларнинг тугунлардан тугунлар орасига ўтиши ички энергиянинг

$$\Delta U_F = n \Delta u_F \quad (\text{II},19)$$

га ортишига олиб келади. Бу ҳолда Гиббс эркин энергияси

$$G = n(\Delta u_F - T \Delta S_T + p \Delta V) - kT \{ [N \ln N - (N-n) \ln(N-n) - n \ln n] + [N' \ln N' - (N'-n) \ln(N'-n) - n \ln n] \} \quad (\text{II},20)$$

кўринишни олади, бу ерда p - босим, ΔV - ҳажм ўзгариши. Нуқсонларнинг иссиқлик мувозанати шarti эркин энергиянинг n га нисбатан минимуми орқали аниқланади

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

(II,20) ни дифференциаллаб

$$\Delta u_F - T \Delta S_T + p \Delta V = kT \ln((N-n)(N'-n)/n^2) \quad (\text{II},21)$$

ни оламиз. Бу ердан босим таъсирини ҳисобга олмасак

$$n = \sqrt{(N-n)(N'-n)} \exp(\Delta S_T/2k) \exp(-\Delta u_F/2kT) \quad (\text{II},22)$$

ёки $n \ll N, N'$ бўлганлиги учун

$$n = \sqrt{NN'} \exp(\Delta S_T/2k) \exp(-\Delta u_F/2kT) \quad (\text{II},23)$$

Френкель нуқсони ҳосил бўлишида термик энтропиянинг ортиши нуқсон яқинида панжара атомлари тебраниш частотасининг ўзгариши билан боғлиқ. ΔS_k ни

$$\Delta S_k = S_T' - S_T = 3kZ \ln v/v' \quad (\text{II},24)$$

кўринишда ёзиш мумкин. Бу ерда v, v' - Френкель нуқсони борлигида ва йўқлигида тебраниш частоталари, Z - конфигурацион сон. Бу ифодани (II,23) га қўйиб

$$n = \sqrt{NN'} (v/v')^{3/2} \exp(\Delta S_T/2k) \exp(-\Delta u_F/2kT) \quad (\text{II},25)$$

ифодани ҳосил қиламиз. Бу ифодадан Френкель нуқсонлари концентрацияси температурага экспоненциал равишда пропорционал эканлиги келиб чиқади. NN' даража кўрсаткичидаги $\frac{1}{2}$ бир вақтда тугунлараро атом ва вакансия ҳосил бўлишини билдиради.

2.3 Элементар кристалларда Шоттки нуқсонлари концентрациясининг температурага боғлиқлиги

Шоттки нуксони ҳосил бўлишида Гиббснинг эркин энергияси

$$\Delta G = n\Delta u_F - kT \ln \frac{N!}{(N-n)!n!} - nT\Delta S + p\Delta V_v \quad (\text{II},26)$$

орқали ифодаланиши мумкин. Бу ерда ΔU_v – вакансия ҳосил бўлиш энергияси, ΔV – 1 та вакансия ҳосил бўлишида ҳажмнинг ўзгариши, n – вакансия концентрацияси. ΔV – битта атом ҳажмига тенг эмас, чунки ҳар бир вакансия атрофида панжара релаксацияси юзага келади. $\frac{\partial G}{\partial n} = 0$ шартдан концентрациянинг температурага боғланишини оламиз

$$n = N \exp(\Delta S_T/k) \exp(-\Delta u_F/kT) \quad (\text{II},27)$$

Агар вакансия яқинида $v' < v$ частотали z киришма атомлари бўлса, кристалда $3nZ$ та v' частотали, $3N-3nZ$ та v частотали осцилляторлар ҳосил бўлади. Бу ердан термик энтропиянинг ортиши

$$\Delta S_T = 3Zk(1 + \ln \frac{kT}{h v'}) + 3(N/n - Z)k(1 + \ln \frac{kT}{h v}) - 3N/n(1 + \ln \frac{kT}{h v}) = 3Zk \ln v/v' \quad (\text{II},28)$$

га тенг бўлади. Бу ифодани (II,27) га қўйсак

$$n = (v/v')^{3Z} \cdot N \exp(-\Delta u_F/kT)$$

ҳосил бўлади.

2.4 Дивакансиялар ва бирлашмалар ҳосил бўлиши

Вакансиялар концентрацияси маълум бир микдордан ортганда кристалда дивакансия, тривакансия ва нуксонларнинг мураккаб бирлашмалар ҳосил бўлади ва улар кўплаб вакансия бирлашмасидан иборат бўшлиқлар ҳосил бўлишига олиб келиши мумкин. Вакансияларнинг бундай бирикиши системанинг термодинамик мувозанат шarti туфайли содир бўлади, чунки поливакансиялар ҳосил бўлиш энергияси ҳар доим моновакансияларнинг бирикиш энергиясидан кичик бўлади. Масалан, дивакансия ҳосил бўлиш энергияси иккита вакансиянинг ҳосил бўлиш энергиясидан кичик, яъни

$$\Delta U^{(2)} = 2\Delta U^{(1)} - B \quad (\text{II},29)$$

бу ерда B – боғланиш энергияси. Тривакансия ҳосил бўлиш энергияси

$$\Delta U^{(3)} = 3\Delta U^{(1)} - B^1 \quad (\text{II},30)$$

бу ерда B^1 – 3 та вакансия ҳосил бўлиш энергияси.

Моновакансиялар концентрацияси ва уларнинг бирикиши орасидаги муносабатлар таъсирлашувчи массалар қонунидан фойдаланиб чиқарилиши мумкин. Масалан, 2 та вакансиянинг дивакансияга бирикиши

$$V_1 + V_1 \rightarrow V_2 \quad (\text{II}, 31)$$

реакция орқали ифодаланиши мумкин. Концентрацияларни N_{V1} , N_{V2} лар орқали белгилаб

$$N_{V2} = k_1/k_2 N_{V1}^2 = k_1/k_2 N^2 \exp[(2\Delta U - B)] \approx N_{V1}^2 \exp(B/kT) \quad (3.32)$$

3 та вакансияларнинг бирикиши

$$N_{V3} = N_{V1}^3 \exp(B^1/kT) \quad (\text{II}, 33)$$

Жиддий ҳисоб-китоблар (32), (33) формулаларга қўшни нуксонларни таъсирларини ҳисобга олувчи бирикма кўпайтувчи киритиш кераклигини кўрсатади. Бу кўпайтувчилар ўзаро боғлиқ бўлмаган вакансиялар бирлашмаларини ҳисоблаш орқали аниқланиши мумкин. Масалан, дивакансия учун $C = z/\text{II}$, Уларнинг концентрацияси

$$N_{V2} = ZN^2/2 \cdot \exp(-(2\Delta U - B)) \quad (\text{II}, 34)$$

бўлади.

2.5 Бирикмалар ҳосил бўлиши

Реал кристалларда термик нуқтавий нуксонлардан ташқари ёт атом киришмалари ҳам бўлади. Бу киришмалар нуксонлар билан ўзаро таъсирлашиб, бирикмалар ҳосил қилиши мумкин. Бирикмалар киришмалар ўртасида ҳам бўлиши мумкин. Бундай бирикмаларнинг ҳосил бўлиши нафақат термодинамик муносабатларга, балки киришмалар концентрациясига ҳам боғлиқ. Киришма атомлари ва вакансиялар бирикмаларининг концентрацияси таъсирлашувчи массалар конуни орқали аниқланади

$$V + C \rightarrow VC \quad (\text{II}, 35)$$

Агар вакансиялар ва бирикмалар концентрацияларини N_k , N_v , N_c деб белгиласак

$$N_k = \alpha N_v N_c \exp(-\Delta u_k/kT), \quad (\text{II}, 36)$$

муносабатни оламиз. Бу ерда ΔU_k - бирикма ҳосил бўлиш энергияси, α - киришма атомини вакансия билан қўшни бўлиш эҳтимоллиги.

Худди шундай усул билан акцептор ва донор характерли киришмалар ўртасида ҳосил бўлган бирикмалар концентрациясини ҳам аниқлаш мумкин. Агар $A^+ + D^- \rightarrow C$ бўлса, мувозанат ҳолатида уларнинг концентрацияси

$$\frac{N_c}{N_A - N_D} = K_\alpha(T), \quad (\text{II}, 37)$$

бўлади, бу ерда $K_c(T)$ - бирикма ҳосил бўлиш доимийси бўлиб, у температурага экспоненциал равишда боғланган.

$$K_\alpha = \beta \exp(-\Delta u_c/kT), \quad (\text{II}, 36)$$

β^- боғланмаган акцептор ва донорларнинг қўшни бўлиш эҳтимоллиги.

2.6 Бинар бирлашмаларда термик нуқсонлар

Бинар бирлашмали кристалларда Френкель ва Шоттки нуқсонлари панжарани ҳар хил қисмларида ҳосил бўлиши мумкин: 1) А панжарадаги вакансия, 2) В панжарадаги вакансия, 3) А панжарадаги жуфт нуқсон, 4) В панжарадаги жуфт нуқсон, 5) А панжара атомларининг В панжара тугунлари орасига ўтиши, 6) В панжара атомларининг А панжара тугунлари орасига ўтиши, 7) А панжара атомларининг В панжара вакансиясига ўтиши, 8) В панжара атомларининг А панжара вакансиясига ўтиши. Агар бу кристалда яна киришма атомлари ҳам бўлса, нуқтавий нуқсонлар сони кескин ортиб кетади.

Киришмасиз кристалларда турли нуқсонларнинг концентрациялари таъсирлашувчи массалар қонунига бўйсунди, уларнинг умумий концентрацияси Гиббс энергиясининг минимумидан топилади.

А панжарада N_{iA} тугунлараро атом, В панжарада N_{iB} тугунлараро атом, N_{vA} , N_{vB} та вакансиялари бўлган АВ бинар кристални кўрамиз. α –А панжара тугунлари бирлигига тўғри келувчи тугунлараро атом, β –В панжара тугунлари бирлигига тўғри келувчи тугунлараро атом бўлсин. Аввалги пунктдагига ўхшаш

$$\frac{N_{vA}}{N_A} \left(\frac{\alpha N_A - N_{iA}}{\alpha N_A} \right)^\alpha = \exp(-\Delta u_{vA}/kT), \quad (II,39)$$

$$\frac{N_{iA} N_A}{(N_A - N_{vA})} \frac{(\alpha N_A)^\alpha}{(\alpha N_A - N_{iA})^{\alpha+1}} = \exp(-\Delta u_{iA}/kT), \quad (II,40)$$

$$\frac{N_{vB}}{N_B} \left(\frac{\beta N_B - N_{iB}}{\beta N_B} \right)^\beta = \exp(-\Delta u_{vB}/kT), \quad (II,41)$$

$$\frac{N_{iB} N_B}{(N_B - N_{vB})} \frac{(\beta N_B)^\beta}{(\beta N_B - N_{iB})^{\beta+1}} = \exp(-\Delta u_{iB}/kT), \quad (II,42)$$

бу ерда $\Delta U_{\epsilon A}$, ... А ва В панжараларда вакансия ва тугунлараро атом ҳосил бўлиш энергиялари. Одатда $\alpha=\beta=1$ бўлганлиги учун

$$N_{iA} = N_{vA} = \sqrt{2} N_A \exp\left(-\frac{\Delta u_{iA} + \Delta u_{vA}}{kT}\right), \quad (II,43)$$

$$N_{iB} = N_{vB} = \sqrt{2} N_B \exp\left(-\frac{\Delta u_{iB} + \Delta u_{vB}}{kT}\right), \quad (II,44)$$

Юқоридаги барча формулаларда ΔS_T термик энтропиянинг ўзгариши ҳисобга олинмади. Уни ҳисобга олиш $\exp(\Delta S_T/k)$ кўпайтмани юзага келтиради. Бинар киришмалар учун ΔS_T ни ҳисоблаш ўта мураккаб.

Ион кристалларда одатда жуфт нуқсонлар эмас, балки Шоттки нуқсонлари: анион панжарада мусбат вакансиялар, катион панжарада манфий вакансиялар юзага келади. Заряднинг сақланиш қонунига асосан, уларнинг концентрациялари тенг бўлади. Агар кристалда электрон ёки ковак бўлса, бу тенглик бажарилмайди. Ҳар бир панжарада нуқсонлар концентрациялари таъсирлашувчи массалар қоунидан топилади

$$N_{vA}N_{vB}/N^2=K(T)=\exp(-\frac{\Delta u_{vA}+\Delta u_{vB}}{kT}), \quad (II,45)$$

Бу ифоданинг биринчи ҳади $U(V_0)$ нинг минимуми бўлганлиги учун 0 га тенг.

Кристалнинг иссиқликдан кенгайиш коэффиценти

$$\alpha=(V-V_0)/V_0T$$

ни киритиб

$$du/dV=\alpha V_0T(d^2u/dV^2)_{V_0}$$

ифодани оламиз ёки

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

Нуқсон ҳосил бўлиш энергияси кристалл энергияси билан боғлиқ бўлганлиги учун унинг кенгайиши ҳисобга олинган. Шоттки нуқсони ҳосил бўлиш энергияси

$$\Delta u_v=\Delta u_v^0+\alpha V_0T d\Delta u_v/dV \quad (II,51)$$

Френкель нуқсони ҳосил бўлиш энергияси

$$\Delta u_F=\Delta u_F^0+\alpha V_0T d\Delta u_F/dV \quad (2,52)$$

Бу ерда Δu_v^0 - $T=0$ да нуқсон ҳосил бўлиш энергияси

Иккала ифодада ҳам ҳосилалар манфий. (II,51), (II,52) ларни (II,24), (II,26) ларга қўйиб

$$n_F=(NN')^{1/2}(v/v')^{3Z}\exp(-\Delta u_F^0/2kT)\exp(-\frac{\alpha V_0}{2k}\frac{d\Delta u_F}{dV}), \quad (II,53)$$

$$n_v=N(v/v')^{3Z}\exp(-\Delta u_v^0/2kT)\exp(-\frac{\alpha V_0}{2k}\frac{d\Delta u_v}{dV}), \quad (II,53)$$

ларга эга бўламиз.

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

алмаштиришлар бажариб, Френкель ва Шоттки нуқсонлари концентрациялари учун қуйидаги формулаларни оламиз:

$$n_F = A(NN')^{1/2}(v/v')^{3Z} \exp(-\Delta u_F/2kT), \quad (\text{II},55)$$

$$n_v = B(v/v')^{3Z} N \exp(-\Delta u_v/2kT), \quad (\text{II},56)$$

NaCl кристалли учун $(v/v')^{3/2}$ нинг қиймати Мотт томонидан баҳоланган. $\alpha=1/2 \cdot 10^{-4}$ бўлганда $\Delta u_v=1,7$ эВ, $d \ln \Delta u_v / d \ln V=2$, $v/v'=2$, $Z=2$ ва $B \approx 100$, $(v/v')^{3Z} \approx 64$ бўлади. Бошқа кристалларда A ва B лар қийматлари $10 \div 100$ орасида ётади. Шоттки ва Френкель нуқсонлари ҳосил бўлиш энергиясини ҳисоблаш ўта мураккаб бўлиб, ҳозиргача охирига етказилмаган масаладир.

Ионни кристалл ҳажмидан сиртига кўчириш энергияси ион кристаллар учун 10 эВ, яримўтказгичлар учун бир неча эВ ни ташкил этади. Нуқсон ҳосил бўлиш энергиясини аниқлаш учун панжаранинг эластик релаксациясини ва ҳар бир нуқсон атрофидаги панжара қутбланишини ҳисобга олиш керак. Бу эса нуқсон ҳосил бўлиш энергиясини камайтиради.

Шоттки нуқсони ҳосил бўлишида панжара эластик деформация энергияси $\sim 1/R^3$ бўлиб, жуда кичик миқдордир. Шунинг учун нуқсон ҳосил бўлишига катта энергияли қўшни атомлар кучли таъсир кўрсатади. Тугунлараро атом ҳосил бўлишида панжара сезиларли даражада бузилади. Бу ҳолда қўшни атомлар силжиши панжара доимийсининг 20% гача етади, эластик деформация энергияси эса бир неча эВ гача етади.

Нуқсон атрофида электр зарядларининг қайта тақсимланиши, яъни қўшни ионларнинг қутбланиши нуқсон ҳосил бўлиш энергиясининг камайтишига кучли таъсир кўрсатади.

Ионли кристалларда биринчи координацион сферадаги зарядлар бошқаларига нисбатан кўпроқ силжийди. Бу нуқсон атрофида электр майдони ҳосил бўлишига ва нуқсон ҳосил бўлиш энергиясининг камайтишига олиб келади.

Шоттки нуқсон ҳосил бўлиш энергияси биринчи марта Йост томонидан ҳисобланди, уни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\Delta u_v = \Delta u_v' - e\phi/2$$

ош тузи учун

$$\Delta u_v' = -k_m e^2 / a(1-1/p) \quad (\text{II},58)$$

бу ерда $k_m=1.746$ -Маделунг доимийси, $1/p$ - сиртлараро масофа, a —ўзаро итариш кучини ҳисобга олувчи ҳад. Вакансияни шар шаклидаги бўшлиқ деб ҳисоблаб, унинг марказидаги потенциални

$$\varphi = \int_x^{\infty} \frac{P}{r^2} 4\pi r^2 dr \quad (\text{II},59)$$

кўринишда ёзиш мумкин, бу ерда кутбланиш

$$P = \frac{1}{4\pi} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right) \frac{e}{r^2}, \quad (\text{II},60)$$

бу ерда ε - диэлектрик доимий, r – вакансия радиуси.

У холда

$$\varphi = \left(1 - \frac{1}{\varepsilon}\right) \frac{e}{x} \quad (\text{II},61)$$

(2,59) интегралнинг аниқлиги қуйи чегаранинг аниқлигига боғлиқ. Хантингтон ва Зейтцлар томонидан баъзи металлларда (Cu, Ag, Au) вакансия ва дивакансия ҳосил бўлиш энергиялари ҳисобланган ва улар тажриба натижалари билан асосан мос келади.

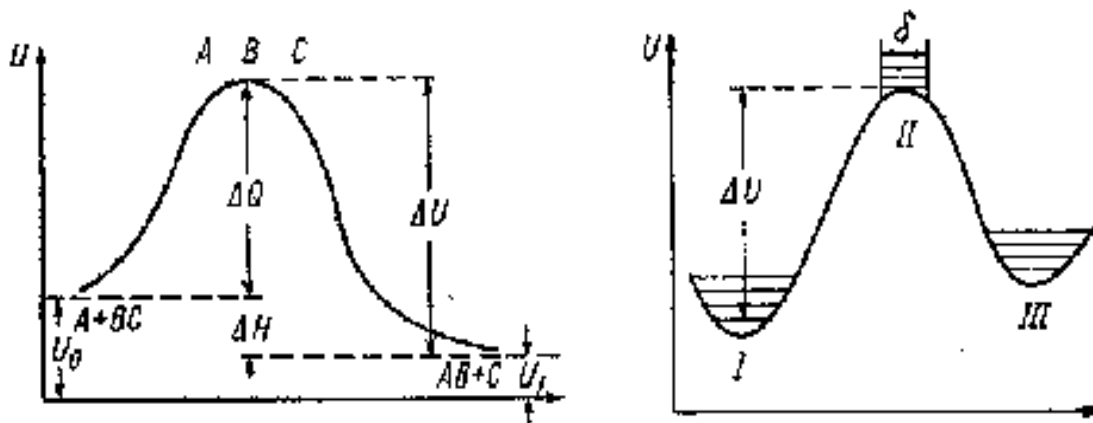
Назорат саволлари

1. Таъсирлашувчи массалар қонуни?
2. Нуқтавий нуққсонларга температура таъсири?
3. Бирикмалар нима ва улар қандай пайдо бўлади?
4. Бинар бирикмалардаги термик нуқсонлар табиати?
5. Нуқсон ҳосил бўлиш энергиясининг таркиби?

3- БОБ. ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАРДА ДИФФУЗИОН ЖАРАЁНЛАР КИНЕТИКАСИ

3.1. Диффузия ва реакцияларнинг мутлоқ тезлиги назарияси

Кинетика назариясига асосан диффузия ва парчаланиш ёки кимёвий бирикмалар ҳосил бўлиши реакциялари ўртасида яқин ўхшашлик бор.



7-расм. $A+BC$ ҳолатдан $AB+C$ ҳолатга ўтишида система потенциал энергиясининг ўзгариши

8-расм. Бошланғич (I), фаоллашган (II) ва охири ҳолатларда системанинг энергетик сатхлари

Ҳақиқатда, AB молекулаининг A ва B атомларга парчаланиши ($AB \rightarrow A+B$) ёки қайта жараён ($A+B \rightarrow AB$) зарраларнинг маълум реакция энергетик тўсиғини енгизиши орқали амалга оширилади. Диффузияланувчи зарранинг бир мувозанатий ҳолатидан бошқасига ўтиши бу зарранинг иккала мувозанатий ҳолати орасидаги энергетик тўсиқни енгиб ўтиш билан боғлиқ (7-расм). Бу диффузия жараёни учун реакцияларнинг мутлоқ тезлиги назарияси усулини қўллаб, диффузион параметрларни ҳисоблаш учун фойдаланиш мумкин.

Реакция тезлиги назариясининг асосий ғояси қуйидагича. Зарралар системасининг бошланғич ҳолатдан якуний ҳолатга ўтиши билан боғлиқ ҳар қандай жараён шундай тарзда кечадики, бунда система қандайдир критик ҳолатдан ўтади. Бу ўтиш ҳолати активлашган бирикма номини олган. Активлаштирилган бирикмани содда ҳолда A атоми ва BC молекула ўртасидаги реакциялар мисолида кўрсатиш мумкин (8-расм). Тасаввур қилайлик, A ва BC яқинлашувида алмашиниш реакцияси рўй беради:



Айтайлик BC молекуласида яқка атомлар бир-бири билан ковалент боғланган, A атом эса битта валент электронга эга бўлсин. U_0 билан системанинг бошланғич потенциал энергиясини белгилаймиз. Энди A атомини BC молекула билан яқинлаштира бошлаймиз. Бунда электронларнинг ўзаро таъсири асосида атомлар орасидаги тортишув BC молекуласида камайиб боради ва A атоми билан BC молекула ўртасидаги итаришув ортади.

Бу ҳол система потенциал энергиясининг ортишига олиб келади. Кейин A ва BC орасида масофа муайян қийматга етганда система критик ҳолатга келади, бунда A ва B , B

ва С орасидаги тортишув ва итаришув кучлари тенг бўлади. А ва ВС нинг янада яқинлашуви А га В нинг тортишиши ва С нинг итарилишига олиб келади. Бу жараён системанинг потенциал энергияси камайиши билан унинг U_1 потенциал энергияли янги АВ+С ҳолатига ўтгунга қадар давом этади.

8-расмдан кўринишича, система бир ҳолатдан бошқасига ўтишидан олдин, яъни алмашинув реакциясигача, таъсирланувчи зарралар энергетик тўсиқ максимумига тенг энергияга эга бўлишлари лозим. А-В-С атомларининг максимум нуқтасидаги жойлашуви активлаштирилган ҳолат ёки активлашган бирикмадир. Бу ҳолатда атомлар шундай жойлашганки, В ёки А билан, ёки С билан боғланиши мумкин. Атомларнинг реакция координаторлари абсцисса ўқи йўналишидаги ҳар қандай кичик силжиши системани ёки яқиний ҳолатга ўтишига ёки бошланғич ҳолатига қайтишига олиб келиши мумкин. Потенциал эгри чизик максимуми энергияси билан системанинг бошланғич ҳолатидаги энергияси фарқи-шу жараённинг ΔQ активлаш энергиясини ҳосил қилади. 8-расмдан кўринишича, системанинг қайта ўтиши $\Delta U = \Delta Q + \Delta H$ потенциал барьерни енгиб ўтиши билан боғлиқ. Бу ерда ΔH -бир томондан АВ+С, бошқа томондан А+ВС бирикмалари орасидаги иссиқлик сақлаш орасидаги фарқи, яъни доимий босимдаги реакция иссиқлиги.

Бундай кимёвий реакция кинетикаси сон жиҳатдан ҳам баҳоланиши мумкин. Статистик муносабатлардан фойдаланиб, активлаштирилган бирикмалар зичлигини, уларнинг ўртача яшаш вақтини, активлаштирилган бирикманинг тўсиқ чўққисидан ўтиш тезлиги билан аниқланувчи реакция тезлигини, мувозанатий доимийни ва бошқа муҳим катталикларни ҳисоблаб топилади. Масалан, активлашган бирикмалар N^* зичлиги тўсиқ чўққисида қуйидагича ифодаланиши мумкин:

$$N^* = N f, \quad (\text{II}, 2)$$

бу ерда N-молекулаларнинг ҳажм бирлигидаги умумий сони. Бир ўчламли ҳол учун фақат илгариланма ҳаракатнинг эркинлик даражаси ҳисобга олинади, δ -кенгликдаги потенциал ўрада ҳаракатланувчи зарра энергияси сатҳлар тўпламига эга (8-расм) бўлиб, улар қуйидаги тенгликдан топилади:

$$\varepsilon_n = \frac{n^2 h^2}{8 \delta^2 m}, \quad (\text{III}, 3)$$

бунда m-зарра массаси, n-имконий энергетик сатҳлар сони, h-Планк доимийси. Тақсимот функцияси f бу ҳолда қуйидаги интеграл билан ифодаланади:

$$f = \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right) dn, \quad (\text{III}, 4)$$

(III,3) ни (III,4) га қўйиб, тақсимот функцияси учун қуйидаги ифодани оламиз

$$f = \left\{ \frac{2\pi mkT}{h} \right\}^{\frac{1}{2}} \delta , \quad (\text{III},5)$$

бундан

$$N^* = N \left(\frac{2\pi mkT}{h} \right)^{\frac{1}{2}} \delta , \quad (\text{III},6)$$

Бу ифодалардан, реакция тезлигини ҳам топиш мумкин. Маълумки, ҳар қандай кимёвий реакция тезлиги активлашган бирикмаларнинг сиғим бирлигидаги зичлиги ва потенциал тўсиқ чўққисидан ўтиш сони билан аниқланади. δ -кенгликдаги тўсиқ орқали активлашган бирикмаларнинг ўтиш ўртача тезлиги $\bar{v}$ ни қуйидагича аниқлаймиз:

$$\bar{v} = \frac{\delta}{\tau^*} , \quad (\text{III},7)$$

бу ерда τ^* -активлашган бирикмаларнинг реакция потенциал тўсиғидан ўтиш вақти. У ҳолда, бундай реакция тезлиги K (реакция потенциал тўсиғи орқали вақт бирлигида ўтган зарралар сони) қуйидагича ифодаланиши мумкин:

$$K = \frac{N^*}{\tau^*} , \quad (\text{III},8)$$

Активлашган бирикмаларнинг потенциал тўсиқ орқали ўтишининг ўртача илгариланма тезлиги $\bar{v}$, ҳаракат тўғри реакция йўналишида борганда ва тезликлар тақсимооти Максвелл статистикасига бўйсунганда қуйидагича ёзилиши мумкин:

$$\bar{v} = \frac{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) v dv}{\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv} = \left(\frac{kT}{2\pi m}\right)^{\frac{1}{2}} , \quad (\text{III},9)$$

Бу ердан активлашган бирикманинг тўсиқ орқали ўтишининг ўртача вақти—активлашган бирикманинг ўртача яшаш давомийлиги бўлади:

$$\tau^* = \frac{\delta}{\bar{v}} = \delta \left(\frac{2\pi m}{kT} \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (\text{III},10).$$

Реакция тезлиги (III,6) ни эътиборга олган ҳолда қуйидагича ифодаланиши мумкин:

$$K = N^* \frac{\bar{v}}{\delta} = N \frac{kT}{h} . \quad (\text{III},11)$$

Бунда, тўсиқ орқали ўтаётган ҳар бир активлашган бирикма парчаланади ва қайта ўтишлар йўқ деб тахмин қилинади. Умумлаштирилган ҳолда қайта ўтишларни ҳам, ўтиш

коэффициенти η ни киритган ҳолда, эътиборга олиш мумкин. Бошқа томондан, реакция тезлигини қуйидагича ифодалаш мумкин:

$$K = K_0 N_A N_B \dots \quad (\text{III}, 12)$$

Бу ерда K_0 -шу реакциянинг нисбий тезлиги $N_A, N_B \dots$ -таъсирлашувчи таркибловчилар зичлиги (III, 11) ни (III, 12) билан таққосласак

$$K_0 = \frac{kT}{h} \frac{N}{N_A N_B \dots} = \frac{kT}{h} K_c \quad (\text{III}, 13)$$

ифодани оламиз.

Бу ерда, K_c -таъсирлашувчи таркибловчи ва активлашган таркибловчилар ўртасидаги мувозанат доимийси. Бошланғич модда активлашган таркибловчилар билан мувозанат ҳолида турганда, мувозанат доимийси ҳам бошланғич ва якуний ҳолатлар тақсимот функцияси нисбати орқали ифодаланади:

$$K_c = \frac{F^*}{F_A F_B \dots} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right). \quad (\text{III}, 14)$$

Бу ерда F^*, F_A, F_B -активлашган бирикма ва таъсирланувчи таркибловчиларнинг тўлиқ тақсимои функцияларини ифода этади. F нинг қийматлари барча ҳолатлар учун (илгариланма, тебранма ва бошқа ҳаракат турлари) экспотенциал кўпайтма - система ҳолатининг бошланғич ва якуний нол сатҳлар Σf_i га тенг фарқини инобатга олади. (III, 13) ни эътиборга олган ҳолда, реакцияларнинг нисбий тезлигини

$$K_0 = \frac{kT}{h} \frac{N}{F_A F_B \dots} \exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right). \quad (\text{III}, 15)$$

кўринишида ёзиш мумкин.

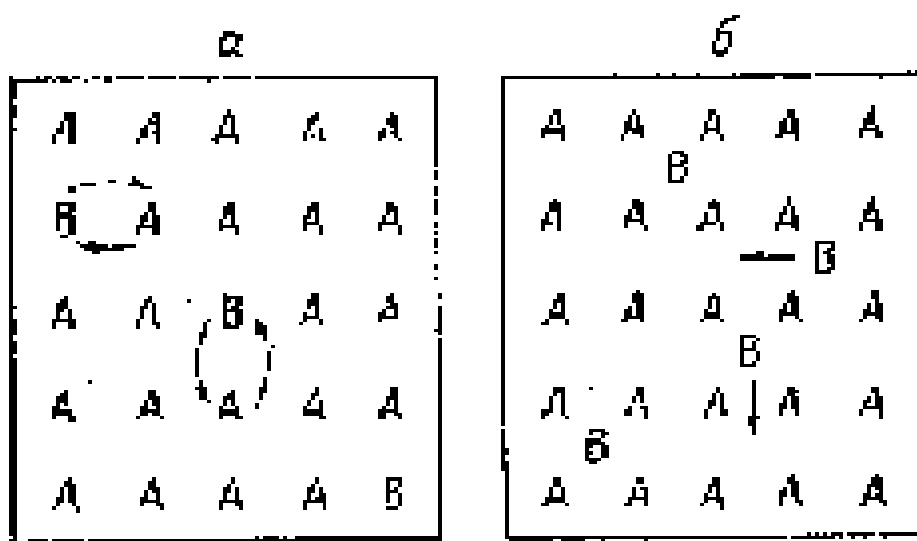
Реакцияларнинг мутлоқ тезлиги назариясини вакансия диффузиясига ҳам қўллаш мумкин, уларни реакцияда иштирок этувчи таркибловчиларидан бирининг квази зарралари сифатида кўриш мумкин.

3.2. Суқилма киришма атомларининг диффузияси

Суқилма киришма атомлар диффузияси жараёни қаттиқ жисмлардаги диффузиянинг энг содда ва ёрқин мисolidир. Диффузия механизми бу ҳолда атомларнинг бир тугунлар оралиғидан бошқасига бирин-кетин ўтишидир (9-расм, б). Суялтирилган эритмалар ҳолатида атомлар сакрашини бир-бирига боғлиқ эмас деб ҳисоблаб ва диффузияни зарраларнинг бетартиб ҳаракат жараёни деб ҳисоблаш мумкин.

Суқилма қаттиқ эритмаларидаги диффузия коэффициентини формуласини келтириб чиқаришга ўтишдан олдин, диффузия–зарраларнинг бетартиб ҳаракати жараёни сифатидаги масалани умумий ҳолда кўриб чиқамиз.

Фараз қилайлик, x ўқи йўналишида диффузияланувчи зарралар зичлиги градиенти мавжуд. Унда диффузия $-x$ ўқи бўйлаб Δx масофадаги зарраларнинг бирин-кетин сакрашидан иборат бўлади. Бунда зарраларнинг олдинга ва орқага сакраш эҳтимоли тенг бўлсин. Икки сакраш орасидаги ўртача вақтни τ деб белгилаймиз. x ўқи орқали ўтадиган ягона текислик майдонида t вақт оралиғида диффузия орқали ўтадиган зарралар сонини $N(t, x)$ билан белгилаймиз.



9-расм. Кристалларда киришма атомлари диффузияси.

а) суқилма, б) тугунлараро.

Бунда $N(t, x)$ функция ўзгариши кичик вақт оралиғида δt ($\delta t \ll \tau$) қуйидагича ифодаланиши мумкин:

$$N(t + \delta t, x) - N(t, x) = \frac{\delta t}{2\tau} [N(t, x - \Delta x) - 2N(t, x) + N(t, x + \Delta x)] \quad (\text{II.16})$$

ёки

$$\frac{N(t + \delta t, x) - N(t, x)}{\delta t} = \frac{1}{2\tau} \{ [N(t, x - \Delta x) - N(t, x)] - [N(t, x + \Delta x) - N(t, x)] \}. \quad (\text{II.17})$$

Бундан, $N(t, x)$ ни Δx масофада секин ўзгаради деб ҳисоблаб ва лимитга ўтиб, қуйидаги дифференциал тенгликни оламиз:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{(\Delta x)^2}{2\tau} \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}. \quad (\text{III.18})$$

Бу Фикнинг иккинчи қонунини ифодалайди.

$$D = \frac{(\Delta x)^2}{2\tau}. \quad (\text{III.19})$$

Бу формула берилган йўналишда зарраларнинг тартибсиз ҳаракати ҳолатида диффузия коэффициенти ифодасини беради. Кўриб чиқиладиган қаттиқ суқилма эритмаларда ўтишлар, атомларнинг кристалда маълум бир геометрик ҳолатларда жойлашуви натижасида зарраларнинг ҳаракати бирмунча тартибли бўлишини назарда тутиш лозим. Шунинг учун (III.19) ни бошқа кўринишда ёзамиз:

$$D = \alpha \frac{d^2}{\tau}, \quad (\text{III.20}),$$

бу ерда d —панжара доимийси, α -кристалл панжаранинг элементар ячейкаси геометриясига боғлиқ кўпайтма. Диффузия ҳолатида суқилма қаттиқ эритмаларда бу кўпайтма—диффузияланувчи зарра ўтиб кетиши мумкин бўлган қўшни тугунлар оралиғи ҳолатини жойлашишини белгилайди. Масалан, чегаралари куб панжаралар учун α кўпайтиргич $1/12$ ва $1/24$ га тенг. (III.20) формулага кирган номаълум параметр τ -атомларнинг бир тугунлар оралиғидан бошқасига ўтишининг ўртача вақти. Шунинг учун қаттиқ суқилма эритмаларида диффузия коэффициентини ҳисоблаш τ -параметрни ҳисоблашдан иборат бўлади.

Эйринг, Верт ва Зинерлар назариясига асосан бу мақсадлар учун реакцияларнинг мутолқ тезлик назарияси формулаларидан фойдаланамиз. Атомларнинг бир тугунлар оралиғидан бошқасига ўтиш частотасини (III.15) формулага асосан қуйидагича ёзамиз:

$$\frac{1}{\tau} = \omega \frac{kT}{h} \frac{\varphi^*}{\varphi}, \quad (\text{III.21})$$

бу ерда ω -потенциал тўсик чўққисидан ўтган зарранинг яна қайтиб орқага ўтмаслик эҳтимоли, φ -бошланғич ҳолатдаги эриган атом + панжара системаси учун, яъни диффузияланувчи атом потенциал чуқури тубида ётган вақтидаги тақсимот функцияси, φ^* -диффузияланувчи атом активлашган ҳолатда—яъни потенциал тўсик чўққисида турган вақтдаги системанинг тақсимланиш функцияси. Бошланғич ҳолатдаги эриган атомнинг эркинлик даражаси активлаштирилган ҳолатдагидан кўра бир даража кўпроқ бўлишлиги боис (III.21) формулада φ^*/φ турли хил эркинлик даражасига эга бўлган икки функция нисбатини олиш учун φ ни икки функция кўпайтмаси кўринишида ифодалаш мумкин;

$$\varphi = \varphi_1 \varphi_1^* \quad (\text{III.22})$$

φ_1 — ν частотада тебранувчи чизигий осциллятор тақсимот функцияси; φ_1^* - диффузия йўналишига перпендикуляр текисликда тебранувчи эритилган атом системаси учун

тақсимот функцияси, бунда эркинлик даражаси сони, активлаштирилган атомлар системасига тенг. Диффузия жараёнида $h\nu/kT < 1$, да

$$\varphi_1 = \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} \approx \frac{kT}{h\nu} \quad (\text{III.23})$$

Бошқа томондан, φ^*/φ бир хил эркинлик даражаси сонига эга бўлган икки тақсимот функцияси нисбати сифатида $\exp(-\Delta G/kT)$ га тенг, бу ерда ΔG -системанинг эркин энергиясининг ўзгариши. Шунинг учун

$$\frac{\varphi^*}{\varphi} = \frac{\varphi^*}{\varphi_1 \varphi_1^*} = \frac{h\nu}{kT} \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right), \quad (\text{III.24})$$

$$\frac{1}{\tau} = \nu \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right). \quad (\text{III.25})$$

Эркин энергия ΔG ўзгаришини атомнинг мувозанат ҳолатдан активлашган ҳолатга потенциал тўсиқ чўққисига ўтишидаги изотермик ишига тенглаштириш мумкин.

Потенциал тўсиқ чўққисига атомнинг ўтишидаги изотермик иш доимий босим остида бўлганлиги сабаб, термодинамик нисбатни қўллаб туриб

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \quad (\text{III.26})$$

$$\frac{1}{\tau} = \nu \exp\left(-\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right) \quad (\text{III.27})$$

ифодага эга бўламиз.

Бу қийматни $1/\tau$ учун (III,20) формулага қўйиб, диффузия коэффициенти учун қуйидагига эга бўламиз:

$$D = \alpha \lambda d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right), \quad (\text{III.28})$$

бу ерда ΔS -активлаштириш энтропияси, ΔH - активлаштириш иссиқлиги, у (I,8) формуладаги активлаштириш энергиясига тенг. D_0 қуйидаги тенглик орқали топилади:

$$D_0 = \alpha \lambda d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right). \quad (\text{III.29}).$$

(III,29) формулани этиборга олиб (III,28) ни қуйидаги кўринишда ёзамиз.

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right), \quad (\text{III.30}).$$

Агар активлаштириш энергиясини модда грамм-молига ҳисоб қилсак, (III,28) ва (III,29) формулалар қуйидаги кўринишга эга бўлади:

$$D = \alpha \lambda d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right), \quad (\text{III.31})$$

$$D = \alpha \gamma d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right) \quad (\text{III},32)$$

(III,32) формулага кирувчи γ катталикка-кристалл панжаранинг тугунлар оралиғидаги диффузияланувчи атомнинг тебраниш частотаси деб қараш мумкин. ΔS параметрни- атомларнинг активлашган ҳолатга ўтиши - яъни диффузияланувчи атомларнинг грам-моль иссиқлигининг ўзгаришини ифодалайди.

ν нинг катталигини баҳолаш учун Верт ва Зинер тахмин қилишича, эриган атомнинг бир тугунлар оралиғидан бошқасига ўтишида атомнинг потенциал энергияси $U(x)$ гармоник қонун

$$U(x) = \frac{1}{2} \Delta H \left(1 - \cos 2\pi \frac{x}{\lambda}\right), \quad (\text{III},33)$$

бўйича ўзгаради, бу ерда x йўл координатаси, λ -икки тугунлар оралиғидаги масофа, ΔH - активация иссиқлигига тенг бўлган икки тугунлар оралиғидаги потенциал тўсик баландлиги. Тебраниш частотаси ν бу ҳолда

$$\nu = \left(\frac{\Delta H}{2m\lambda^2}\right)^{1/2}, \quad (\text{III},34)$$

га тенг, бу ерда m -эриган атом массаси. (III,34) формулани (III,29) га қўйиб, қуйидагини оламиз (ΔS -бир грамм-моль га тегишли):

$$D_0 = \alpha \left(\frac{\Delta H}{2m\lambda^2}\right)^{1/2} d^2 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right) \quad (\text{III},35).$$

Энтропия кўпайтиргичи $\exp(\Delta S/R)$ ни билвосита йўл билан баҳолаш мумкин, бунинг учун қуйидаги тахминларга асосланилади. Агар барча иш панжаранинг эластик энергиясига ўтса, унда

$$\Delta G = \frac{1}{2} \mu l^2 V_a, \quad (\text{III},36)$$

бу ерда μ -силжиш модули, l -силжиш деформацияси, V_a -деформация жойлашган ҳажм. Агар релаксацион жараёнларни инкор қилсак, масалан, доначалар чегарасида, биринчи яқинлашувда μ температуранинг чизиғий функцияси бўлади.

$$\mu = \mu_0 + T \frac{\partial \mu}{\partial T}, \quad (\text{III},37)$$

μ_0 -температура мутлоқ ноль бўлгандаги силжиш модули. Бундан температура ўзгаришида L ва V_a нинг ўзгаришларини эътиборга олмасак ва

$$\Delta S = -\frac{\partial \Delta G}{\partial T}, \quad (\text{III},38)$$

ни эътиборга олсак

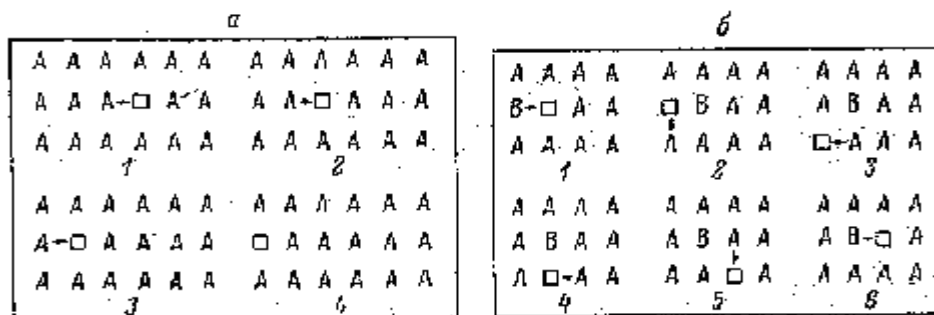
$$\Delta S = -\Delta H \left[\frac{d\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)}{dT} \right] \quad (\text{III},39)$$

ифодани оламиз.

$\frac{\partial \mu}{\partial T} < 0$ лиги сабабли, ΔS катталиги мусбат, $\exp(\Delta S/R)$ кўпайтувчи эса доим бирдан катта. (III,39) формулани эътиборга олган ҳолда (III,35) дан топилган D_0 қийматлари бир қатор суқилма қаттиқ эритмалари учун тажриба натижалари билан қониқарли даражада мос тушади. ΔH активлашиш энергияси қийматини ҳисоблаш учун, олдин айтиб ўтилганидек, қониқарли, тўғри ёки билвосита йўллар ҳали топилмаган.

3.3. Металларда ва бошқа элементар кристаллардаги хусусий атомлар диффузияси

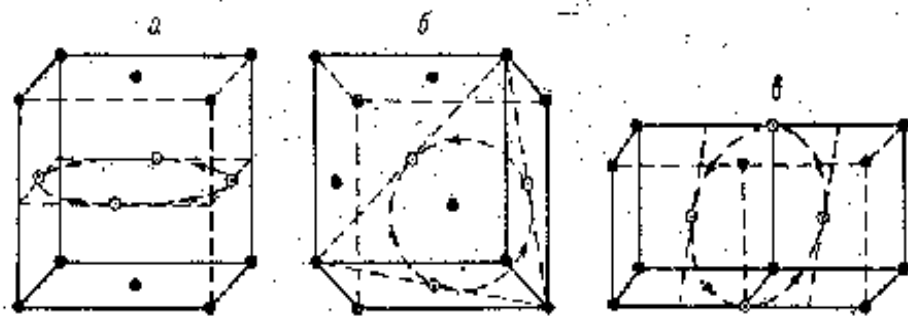
Металл ва бошқа элементар кристаллардаги ўз диффузия механизми суқилма қаттиқ эритмалардаги диффузияга нисбатан анча мураккаб характерга эга.



10-расм. Вакансия диффузия. а) ўз-ўзига диффузия, б) киришма диффузияси.

Бу ерда кристалл бўйлаб атомларнинг ҳаракатланиши учун турли имкониятлар бор: 1) атомларнинг тўғрима-тўғри ўрин алмашинуви; 2) «ҳалқали механизм» - ҳалқа бўйлаб жойлашган атомлар группасининг мос ҳаракати; 3) тугунлар оралиқлари бўйлаб атомларнинг силжиши; 4) вакансиялар бўйлаб атомлар ҳаракати (10-12 расм).

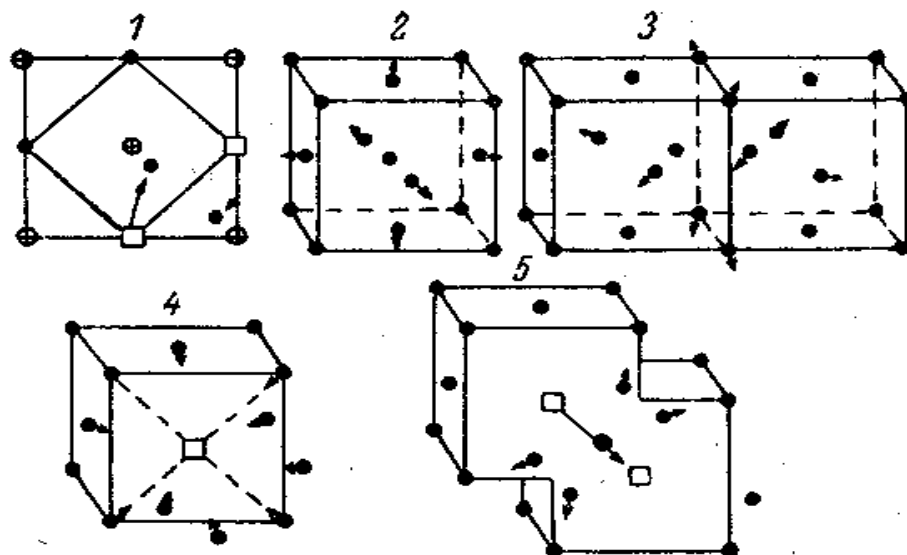
Бу механизмлардан қайси бири ҳақиқатда амалга ошиши ҳақидаги масала ҳар бир ҳол учун қўшимча текширишларни талаб қилади. Аммо, юқорида айтиб ўтилганидек, кўпинча, ҳеч бўлмаганда зич таҳланишли кристаллар учун, диффузиянинг вакансия механизми амалга оширилади, ушбу механизм қуйида кўриб чиқилади.



11-расм. (Зингер бўйича) диффузиянинг халқали механизми а-(4та атом иштирокида) ёқлари марказлашган кубик панжарада, б- (3та атом иштирокида) ёқлари марказлашган кубик панжарада, в-(4та атом иштирокида) хажмий марказлашган қисмларда

Вакансиялар бўйлаб диффузия (III,18) формула орқали тавсиф этилиши мумкин, бунда атомларнинг сакраши бир-бирига боғлиқ бўлмаган ва йўналиши бўйича тартибсиз характерга эга бўлади деб ҳисобланади. (III,20) формуланинг α кўпайтиргичи вакансиялар бўйлаб ўз диффузия ҳолида чегараси марказлашган куб панжара учун $1/2$ ва хажми марказлашган панжара учун $1/8$ га тенг. τ параметрни аниқлаш учун, шунингдек, (III,25) формуладан ҳам фойдаланиши мумкин, уни биз бошқача кўринишда ёзамиз:

$$\frac{1}{\tau} = \omega p \nu \exp\left(-\frac{\Delta G_2}{RT}\right), \quad (\text{III},40)$$



12-расм. Атомларнинг жой алмашиши мумкин бўлган механизмлари

бу ерда ΔG_2 -атомнинг мувозанат ҳолатдан активлашган ҳолатга ўтишидаги изотермик ишга тенг бўлган эркин энергиянинг ўзгариши; ν -кристалл панжара тугунларидаги

атомларнинг мувозанат ҳолатидаги тебраниш частотаси Дебай частотасига тенг; р-диффузиянинг эквивалент йўлларининг сони, у чегараси марказлашган куб панжара учун 12 га, ҳажми марказлашган панжара учун 8 га тенг. ω -яқин жойлашган тугунлар бўш эканлиги эҳтимоли. ω катталик қуйидагича ёзилиши мумкин:

$$\omega = \exp\left(-\frac{\Delta G_1}{RT}\right), \quad (\text{III},41)$$

бу ерда ΔG_1 -вакансия ҳосил бўлишидаги эркин энергиянинг ўзгариши (доимий температура ва босимда). (III,41)ни (III,40) га қўйиб, кейин $1/\tau$ ни (III,20) га қўйиб, ўз диффузия коэффициентини топамиз:

$$D = d^2 \gamma \exp\left(-\frac{\Delta G_1 + \Delta G_2}{RT}\right), \quad (\text{III},42)$$

Термодинамик муносабатлар

$$\Delta G_1 = \Delta H_1 - T\Delta S_1, \quad \Delta G_2 = \Delta H_2 - T\Delta S_2 \quad (\text{III},43)$$

ва (III,37) тенгликлардан фойдаланиб (III,42) ни қуйидагича ёзиш мумкин,

$$D = d^2 \gamma \exp\left(\frac{\Delta S_1 + \Delta S_2}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_1 + \Delta H_2}{RT}\right), \quad (\text{III},44)$$

бу ердан

$$D_o = d^2 \gamma \exp\left(\frac{\Delta S_1 + \Delta S_2}{R}\right) \quad (\text{III},45)$$

$\Delta H_1 + \Delta H_2 = \Delta H$ ва $\Delta S_1 + \Delta S_2 = \Delta S > 0$ диффузия вақтида активлашиш энергияси ва энтропиясига мос келади. Атомнинг активлаштирилган ҳолатга ўтишида бажарилган изотермик иш панжаранинг эластик энергиясига тенг деб тахмин қилсак, энтропия учун ушбу тенгликдан фойдаланиш мумкин:

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

Бошқа томондан, ΔS_1 ҳам мусбат бўлгани учун

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

Шундай қилиб, диффузия вақтида активлаштириш энтропияси доим мусбат катталикка эга деган хулосага келиш мумкин.

ΔS ни баҳолаш учун қуйидаги нисбатдан фойдаланилади :

$$\Delta S = \frac{L\beta\Delta H}{T_{\text{эп}}}. \quad (\text{III},46)$$

Бу ерда $T_{\text{эп}}$ —суюлиш температураси; L - активлаштириш энергиясининг панжаранинг эластиклик энергиясига ўтувчи, улушини ҳисобга олувчи кўпайтма; β -доимий μ силжиш модулининг температурага боғлиқлигига пропорционал:

$$\beta = - \frac{d\left(\frac{\mu}{\mu_0}\right)}{d\left(\frac{T}{T_{\text{суюк}}}\right)}. \quad (\text{III},47)$$

L кўпайтма бир хил тузилишли турли кристаллар учун деярли доимий катталиқ; тажриба маълумотлари бўйича, чегараси марказлашган куб панжарали металллар учун $L = 0,55$.

3.4 Қаттиқ суқилма эритмаларда диффузия

Суқилма қаттиқ эритмаларда эриган атомлар диффузияси механизми элементар кристаллардаги хусусий атомлар диффузияси механизмига ўхшайди. Эриган атомлар кристалларда панжаранинг бўш тугунларига сакраш йўли билан, тугунлар оралиғида панжаранинг атомлари орасида тўғридан тўғри ўрин алмашилиш ёки ҳалқали механизм орқали ҳаракат қилишлари мумкин (12-расм). Эриган атомлар яқинида кристалнинг бошқа жойларига нисбатан вакансия осон ҳосил бўлган ҳолларда диффузияланувчи атомлар ва вакансиялардан иборат бирикмаларнинг ҳаракати орқали ҳам диффузия амалга ошиши мумкин. Хусусий атомлар диффузиясидек, бу ерда ҳам вакансиялар бўйлаб диффузия механизми кўпроқ учрайди. Шунинг учун, диффузия жараёнини тавсифлаш учун (III,44) формуладан фойдаланиш мумкин, бу ерда ΔH_2 ва ΔS_2 -эриган атомнинг потенциал тўсиқ орқали ўтиш вақтидаги активланиш энергияси ва активация энтропияси ўзгаришига тенг, бунда гетеродиффузия жараёнига хусусий атомлар диффузияси жараёни ҳам қўшилишини эътиборга олиш керак. Бироқ вакансиялар, эритувчи атомлари билан алмашилишга нисбатан кристалл панжарада сустроқ боғланишга эга бўлган ўзга атомлар билан ўринларини осонроқ алмашинадилар. Шунинг учун гетеродиффузия жараёни хусусий атомлар диффузиясидан устун туради.

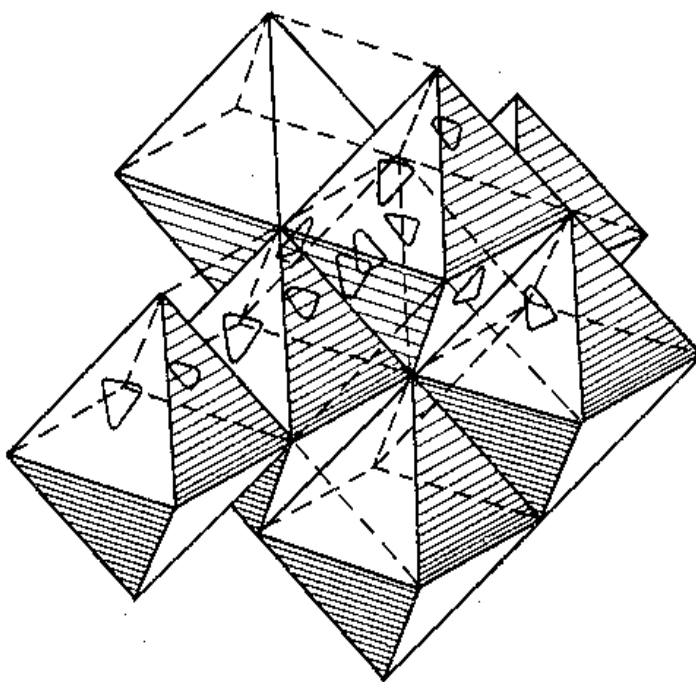
(III,44) формула диффузияланувчи атомларнинг кетма-кет ўрин алмашинуви бири-бирига боғлиқ эмас деган тахминда чиқарилган. Бироқ гетеродиффузия ҳолатида бу шарт бажарилмайди. Ҳисоблашларнинг кўрсатишича, гетеродиффузия учун (III,44) формуланинг ўнг томонини координацион сон катталиги тартибига тенг коэффициентга кўпайтириш лозим.

3.5 Диффузиянинг микроскопик назарияси

Диффузиянинг микроскопик назарияси диффузион параметрларнинг физик хоссаларини янада чуқурроқ очиш, Фик тенгламаларининг қўлланиш чегараларини аниқлаш имконини яратди.

Биз диффузиянинг микроскопик назарияси асосларини тузилиши олмос панжара тузилишига ўхшаш германий ва кремний мисолида изоҳлаймиз.

Олмос панжара икки чегараси марказлашган бўшлиқ диагонали бўйлаб панжара доимийсининг $1/4$ қисмига тенг масофага қадар силжиган куб панжарадан иборат. Ҳар бир атом тетраэдр чўққиларида жойлашган 4 та яқин атомлар билан боғланган боғларнинг узунлиги $b = \frac{a\sqrt{2}}{2}$, бу ерда a -панжара даври.



13-расм. Тетраэдр ва октаэдрларда ясалган олмос панжараси. Штрихланган тетраэдрлар тўлдирилган, қолганлари бўш.

Панжарада тугунлар оралиғи бўшлиқларнинг 2 хил тури бор -тетраэдрик $\left(R_T = \frac{a\sqrt{3}}{8} \right)$ ва октаэдрик $\left[R_o = \frac{a\sqrt{3}}{8} \left(\frac{4}{\sqrt{3}} - 1 \right) \right]$, улар тетраэдрик ва октаэдрик симметрияларда атомлар билан ўралган. Шундай қилиб, олмос панжарасини схематик

тарзда бўш ва атомлар тўлдирилган тетраэдр ва октаэдр кўринишида тасвирлаш мумкин; ҳар бир октаэдр 4 та тўлдирилган ва 4 та бўш тетраэдрлар билан ўралган, ҳар бир бўш тетраэдр эса-4 та октаэдр билан ўралган (13-расм).

Бу панжарадаги атомлар ҳаракати вакансиялар бўйлаб ва тугунлар оралиқлари бўйлаб, умумий ҳолда–вакансиялар ва тугунлар оралиғи бўйлаб бир вақтнинг ўзида амалга ошади. Бунда атомлар тугунлардан тетраэдрик тугунлар оралиғига ўтиши ва қайтиб тугунларга ўтиб, у ердаги вакансиялар билан рекомбинацияланиши мумкин. Шунингдек, бир тугунлар оралиғидан иккинчисига ҳам ўтиши мумкин. Аниқки, бундай ўтишлар турли турдаги тугунлар оралиқлари орасида бўлиши мумкин. Бунинг натижасида диффузиянинг тугунлараро механизмида ҳисоб-китоб учун 2 та диффузия коэффициентини киритиш лозим.

Бу масаланинг математик таҳлили тафсилотига кўп эътибор қилмасдан, биз эътиборни фақат охириги формулалар ва улардан келиб чиқадиган натижаларга қаратамиз.

Вакансиялар тугунлар ва тугунлар оралиғида жойлашган киришма атомлари ва асосий модда атомлари билан жой алмашилиши мумкинлиги ва вакансияларнинг махсус манбалари йўқлиги, яъни вакансиялар миқдорининг ортиши киришма атомларининг тугунлар оралиғига ўтиши ҳисобига рўй беришини тахмин қилиб, киришма атомларининг тўлиқ оқими учун қуйидаги тенглик олинад

$$j_N = - \left[\begin{aligned} &D_{i_1} \nabla N_{i_1} + D_{i_2} \nabla N_{i_2} + (D_{vi_1} + D_{vi_2}) \nabla N_v + D_{g_v} (C_g \nabla N_v - N_v \nabla C_g) \\ &+ D_{g_1} (C_g \nabla N_{i_1} - N_{i_1} \nabla C_g) + D_{g_2} (C_g \nabla N_{i_2} - N_{i_2} \nabla C_g) \end{aligned} \right], \quad (\text{III}, 48)$$

бунда N_{i_1}, N_{i_2}, N_v - тетраэдрик, октаэдрик тугунлар оралиғи ва тугунлардаги киришма атомлар зичлиги, C_g -вакансияларнинг нисбий зичлиги, $D_{i_1}, D_{i_2}, D_{g_v}, D_{g_1}, D_{g_2}$ -киришма атомларнинг тетраэдрик, октаэдрик тугунлар оралиғида, вакансияларда ва тетраэдрик, октаэдрик тугунлар оралиғидан вакансияга ўтиши билан боғлиқ диффузиянинг улиший коэффициентлари N_{i_1}, N_{i_2}, N_v зичликларни тўлиқ киришма атомларнинг зичлиги N орқали ва вакансиялар зичлиги орқали ифодалаб ва диффузиянинг парциал коэффициентлари орасидаги боғлиқликни эътиборга олиб, тўлиқ оқим учун ушбу тенгламани қуйидагича ёзиш мумкин:

$$j_N = - \left[\begin{aligned} &D_{i_1} \nabla \frac{2 + C_g \left(\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right)}{C_g + D_{i_1} \left(\frac{1}{D_{i_1}} + \frac{1}{D_{i_2}} \right)} N + C_g \nabla \frac{C_g D_{g_v} + D_{i_1} \left(\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right)}{C_g + D_{i_1} \left(\frac{1}{D_{i_1}} + \frac{1}{D_{i_2}} \right)} N - \frac{D_{g_v} C_g + D_{i_1} \left(\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right)}{C_g + D_{i_1} \left(\frac{1}{D_{i_1}} + \frac{1}{D_{i_2}} \right)} N \nabla C_g \end{aligned} \right] \quad (\text{II}49)$$

Шунга ўхшаш вакансиялар учун:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_{g_o} \Delta C_g - C_g D_i \Delta \frac{\left(\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right)}{C_g + D_i \left(\frac{1}{D_{i_1}} + \frac{1}{D_{i_2}} \right)} N \quad (\text{III},50)$$

дифференциал тенглама олинган

Диффузиянинг улуший коэффициентлари панжаранинг $\tilde{a}$ доимийси ва мувозанатнинг турли ҳолати орасидаги τ релаксация ўтиш вақти билан боғлиқ:

$$D_{i_1} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{i_1}}, \quad D_{i_{12}} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{i_2}} : \quad (\text{III},51)$$

$$D_{v_{i_1}} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{v_{i_1}}}, \quad D_{v_{i_2}} = \frac{1}{4} \frac{a^2}{\tau_{v_{i_2}}} : \quad (\text{III},52)$$

$$D_{g_1} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{g_1}}, \quad D_{g_2} = \frac{1}{4} \frac{a^2}{\tau_{g_2}} : \quad (\text{III},53)$$

$$D_{g_v} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{g_v}}, \quad D_{g_o} = \frac{1}{8} \frac{a^2}{\tau_{g_o}}. \quad (\text{III},54)$$

Бу ерда $\tau_{i_1}, \tau_{i_2}, \tau_{v_{i_1}}, \tau_{v_{i_2}}$ – релаксация вақтлари, киришма атомларининг тетраэдрик ва октаэдрик тугунлар оралиғидан, вакансиялардан тетраэдрик ва октаэдрик тугунлар оралиғига ўтишлари; τ_{g_1}, τ_{g_2} – атомларнинг вакансиялар билан рекомбинацияланиш вақти; τ_{g_v}, τ_{g_o} – вакансияларнинг, бошқа вакансиядаги киришма атомлари билан ва асосий модда атомлари билан рекомбинацияланиш вақти. Диффузиянинг умумий коэффициентлари орасида қуйидаги боғлиқлик бор:

$$\frac{D_{i_1} D_{v_{i_1}}}{D_{g_1}} = \frac{D_{i_2} D_{v_{i_2}}}{D_{g_2}} \quad (\text{III},55).$$

Худди шундай боғлиқлик релаксация вақтлари орасида ҳам мавжуд

$$\frac{\tau_{i_1} \tau_{v_{i_1}}}{\tau_{g_1}} = \frac{\tau_{i_2} \tau_{v_{i_2}}}{\tau_{g_2}} = \tau_i \quad (\text{III},56)$$

Турли ҳолатларда турувчи атомлар учун мувозанат τ тартибидаги вақтлардан кейин (агар диффузия температураси шундайки, бу вақтлар 10^{-4} - 10^{-5} сек вақтдан ортмаса) киришманинг эришиладиган тақсимланишини квази мувозанатий деб ҳисоблаш мумкин. Ва аксинча, $\tau \sim 10^{-2}$ - 10^{-4} сек чамасида бўлгандаги паст температурада релаксацияни эътиборга олиш лозим, диффузияни эътиборга олмаса ҳам бўлади.

Бу температураларда қаттиқ жисмлардаги электрик ва механик хоссаларнинг релаксациясини ўрганиб (киришма атомларининг бир ҳолатдан иккинчи ҳолатга ўтиши билан боғлиқ бўлган), релаксациянинг вақтларини ва ундан келиб чиққан ҳолда диффузия коэффициентларини ҳам аниқлаш мумкин.

Иккита қизиқарли ҳолатни кўриб чиқамиз.

1. Вакансия зичлиги паст:

$$C_g \ll \frac{D_i}{D_{i,2}}. \quad (\text{III},57)$$

Бу шарт бўйича, киришма атомларининг тугунлардаги зичлиги тугунлар оралиғидаги киришма атомлар зичлигидан кўп марта кам, яъни $N_v \ll N_{i,2}$

Бу ҳолда, вакансия зичлигини белгиловчи ҳадларни эътиборга олмаган ҳолда, қуйидаги ифодани оламиз:

$$j_N = -2 \left(\frac{D_{i_1} D_{i_2}}{D_{i_1} + D_{i_2}} \right) \nabla N. \quad (\text{III},58)$$

Киришманинг эффектив диффузия коэффициенти вазифасини

$$D^* = 2 \frac{D_{i_1} D_{i_2}}{D_{i_1} + D_{i_2}} \quad (\text{III},59).$$

ифода бажаради.

2. Вакансия зичлиги юқори:

$$C_g \gg \frac{D_i}{D_{i,2}}. \quad (\text{III},60)$$

Тугунлардаги киришма атомлари тугунлар оралиғидагидан ортиқ.

$$N_v \gg N_{i,2} \quad (\text{III},61)$$

Бу ҳолда:

$$j_N = -D_{gv} (C_g \nabla N - N \nabla C_g) \quad (\text{III},62)$$

Шундай қилиб, диффузиянинг вакансион механизми ҳолида диффузияланувчи киришма атомларининг вақтга боғлиқ равишда зичлигининг ўзгариши ва вакансияларнинг нисбий зичлигини ифодаловчи дифференциал тенгламаларни ўзаро боғлиқ ҳолда ечиш зарур:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = D_{gv} (C_g \nabla N - N \nabla C_g), \quad (\text{III},63)$$

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D_{g_0} \nabla C_g. \quad (\text{III},64)$$

$D_{g_v} \approx D_{g_0}$. Аммо, киришманинг эффектив диффузия коэффициентини вакансияларнинг нисбий зичлигига мутаносиб бўлганлиги туфайли

$$D = D_{g_v} C_g \quad (\text{III},65)$$

бўлади, у ҳолда $D \ll D_{g_0}$, яъни вакансиялар диффузия коэффициентини киришма атомлар диффузияси эффектив коэффициентидан анча катта бўлади ва $\tau \sim \frac{L^2}{D_{g_0}}$ вақт ичида вакансияларнинг мувозанатли тақсимланиши ўрнатилади (L-диффузион соҳа чуқурлиги).

Демак, намуна юзасида вакансиялар ҳосил бўлиши вақтида уларнинг нотекис тақсимланиши киришма атомлар тақсимланишига бошланғич вақтлардагина таъсир қилиши мумкин.

Вакансиялар диффузия коэффициентини D_{g_v} киришма атомлар диффузияси умумий коэффициентидан юқори эканлигини эътиборга олиб, C_g катталикини унинг мувозанатий C_g^0 миқдорига алмаштириб, (III,49) тенгламани

$$j = -D \nabla N \quad (\text{III},66)$$

кўринишда ёзиш мумкин, бу ерда

$$D = 2D^* \frac{1 + C_g^0 \left(\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right) + \frac{D_{g_v}}{2D^*} C_g^{o2}}{1 + C_g^0 \frac{D^*}{D_i}} \quad (\text{III},67)$$

киришма атомлар диффузиясининг эффектив коэффициентини ифодалайди. D диффузиянинг умумий коэффициентлари ва вакансияларнинг нисбий зичлиги функцияси эканлиги боис, ҳамда бу катталиклар ўзгариши температурага боғлиқ бўлишлиги сабабли, киришма атомлар диффузиясининг D эффектив коэффициентининг температурага боғлиқлиги ҳам турлича бўлади.

(III,67) формуладан келиб чиқиб D ни C_g^0 , бўйича қаторга ёйиб, фақат, чизигий ҳадлар билан чекланган ҳолда қуйидаги ифодага эга бўламиз:

$$D = 2D^* \left[1 + C_g^0 \left(\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} - \frac{D^*}{D_i} \right) \right], \quad (\text{III},68).$$

Бундан:

$$\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} - \frac{D^*}{D_i} > 0. \quad (\text{III},69)$$

Бу ҳолда вакансиялар зичлигининг ўсиши билан D ортиб бориши кўринади.

Агар,

$$\frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} + \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} - \frac{D^*}{D_i} < 0 \quad (\text{III},70)$$

бўлса, диффузия коэффиценти вакансиялар зичлиги ортиши билан камайиб боради. (III,69) ва (III,70) ларни релаксация вақтлари орқали ифодалаб, кўриш мумкинки, (III,69) формуланинг шартлари тугунлар оралиғидаги атомлар яшаш вақти атомларнинг тугундан тугунлар оралиғига ўтиш вақтидан кўпроқ эканлиги ва вакансиялар кўчиши тезлиги ортишини билдиради. Бошқа томондан, (III,70) бўйича, тугундаги атом яшаш вақти тугунлар оралиғидаги вақтдан кўра кўпроқ, яъни вакансиялар диффузияланувчи киришма атомлари учун қопқон бўлиб хизмат қилади ва диффузия коэффциентини камайтиради.

Умумий ҳолда (III,70) шарт бажарилганда диффузия коэффиценти вакансия зичлиги

$$C_g^o = C_{gm}^o \approx \frac{1}{2} \left(\frac{D^*}{D_{gv}} \right)^2 \left[\frac{D^*}{D_i} - \frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} - \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right] \quad (\text{III},71)$$

бўлганда минимумга эга. Бунда

$$D = D_m \approx 2D^* \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{D^*}{D_{gv}} \right)^2 \left(\frac{D^*}{D_i} - \frac{D_{g_1}}{D_{i_1}} - \frac{D_{g_2}}{D_{i_2}} \right)^2 \right]. \quad (\text{III},72)$$

Энди, бу ҳоллар киришма диффузияси эффектив коэффицентининг температурага боғлиқлигига қандай таъсир кўрсатишини аниқлаш қийин эмас. Диффузия коэффицентлари ва вакансиялар зичликлари температурага экспоненциал боғлиқлиги сабабли

$$C_g \sim \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right), \quad D_k \sim \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right) \quad (\text{III},73),$$

(E_k -активлаштириш энергиясининг мос қиймати) киришма атомлар диффузияси эффектив коэффицентига вакансия характерининг таъсири (III,68) формуладаги қавс ичидаги ифода ишорасига ва активлаштириш парциал энергиялари орасидаги

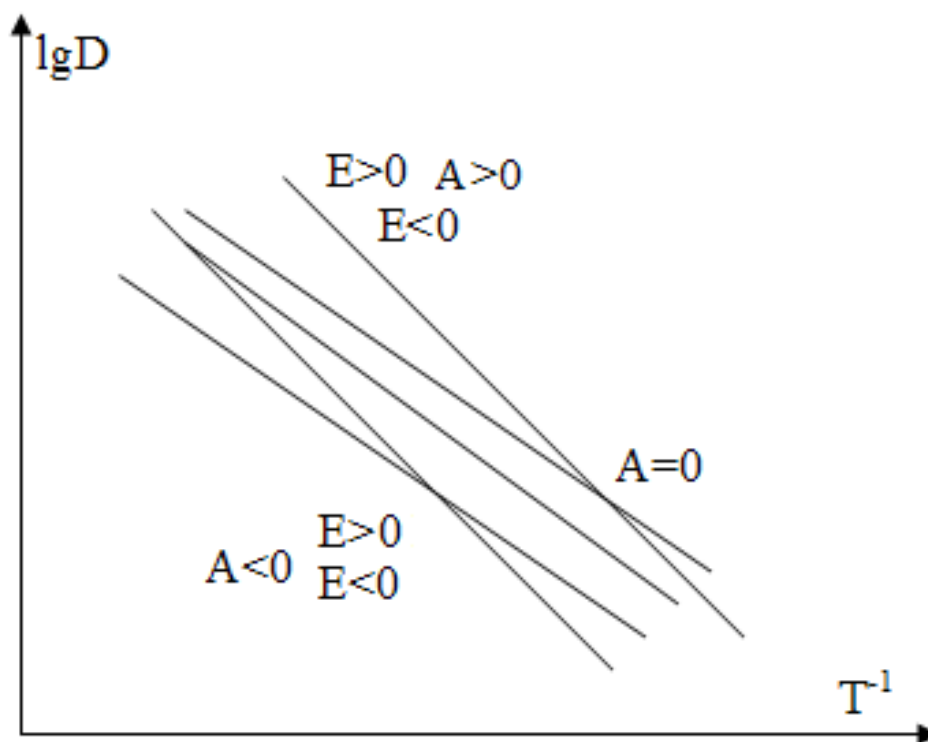
$$D \approx 2D_o^* \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \left[1 + A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \right] \quad (\text{III},74)$$

муносабатга боғлиқ. Бу ерда E - активлаштиришнинг парциал энергиялари орасидаги муносабатга боғлиқ ҳолда мусбат ва манфий катталиққа эга бўлиши мумкин.

Тадқиқотларда диффузия коэффицентининг температурага боғлиқлиги одатда Аррениус тенгламаси билан ифодаланади:

$$D = D^o \exp\left(-\frac{E_o}{kT}\right) \quad (\text{III},75)$$

Бажарилган таҳлиллар кўрсатишича, $A > 0$ ва $E < 0$ шароитида вакансиялар ўлчанаётган E_0 активлаштириш энергияси қийматининг камайишига, $E > 0$ ҳолатида E_0 ва D_0 ортишига олиб келади. Агар $A < 0$, бўлса $E > 0$ бўлган ҳолда тажрибада ўлчанаётган E_0 катталиги ортиб боради, агар $E < 0$ бўлса, E_0 ва D_0 камаяди. Кўриб чиқилган ҳоллар 14-расмда график шаклида кўрсатилган.



14-расм. Эффе́ктив диффузия коэффи́центининг температурага боғлиқлиги.

3.6. Кўп таркибли системаларда атомлар диффузияси термодинамикаси

Аввалги бобларда баён этилган диффузиянинг феноменологик назарияси қаттиқ жисмларнинг кристалл панжарасидаги атомларнинг ҳаракати билан боғлиқ элементар жараёнлар кинетикасига асосланган. Аммо баъзи ҳолларда мураккаб системалардаги диффузияни жараённинг термодинамик тавсифидан фойдаланиш қулай.

Диффузиянинг термодинамик шартларини умумий ҳолатда кўриб чиқамиз. Фикнинг биринчи қонунига асосан йўналтирилган диффузия кўчиши содир бўлиши учун бу системада зарраларнинг зичлик градиенти нолга тенг бўлиши зарур. Диффузия оқими нолга тенг бўлганда, $\text{grad } N \neq 0$ бўлишига қарамай у содир бўлишини тасаввур қилиш мумкин. Бундан ташқари, диффузия концентрация ортиши томонига ҳам йўналган

бўлиши мумкин (чикиб келувчи диффузия). Шунинг учун умумий кўрилатган системада кимёвий потенциал градиенти мавжудлиги термодинамик шарт бўлади. μ_1 ва μ_2 орқали ихтиёрий системадаги 2 та нуктадаги 1 ва 2 да кимёвий потенциални белгилаймиз. Фараз қилайлик $\mu_1 > \mu_2$, бўлсин, у ҳолда системадаги эркин энергия ўзгариши бир грамм-атом модданинг 1 нуктадан 2 нуктага диффузион кўчиши ўзгаришини қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин:

$$\Delta G = \mu_1 - \mu_2 = \frac{\partial \mu}{\partial x} \partial x + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} \frac{(\partial x)^2}{2} \dots \quad (\text{III}, 76)$$

қаторнинг биринчи хади билан чегараласак, 1 грам атомга таъсир қилувчи эффектив диффузион куч

$$F_{\text{эфф}} = - \frac{\partial \mu}{\partial x} \quad (\text{III}, 77)$$

бўлади.

i-турдаги бир атом ҳисобга олинганда эффектив диффузион куч қуйидагича ифодаланиши мумкин:

$$f_i = - \frac{1}{N_A} \frac{\partial \mu_i}{\partial x}, \quad (\text{III}, 78)$$

бу ерда N_A -Авагадро сони, μ_i – i таркибининг кимёвий потенциалли.

Системанинг кимёвий потенциалли умумий ҳолда температура, босим, шунингдек ташқи параметрларнинг функциясидир (электр майдон, механик кучланиш ва бошқалар). Идеал эритмалар учун

$$\mu_i = G_o(T, p) + kT \ln N_i, \quad (\text{III}, 79)$$

бу ерда N_i - кўрилатган эритмадаги i- таркибининг моляр улуши, $G_o(T, p)$ -тоза модданинг моляр эркин энергияси. Изотермик ва изобарик жараён учун,

$$G_o(T, p) = \text{const} = \mu_{oi}, \quad (\text{III}, 80).$$

Шунинг учун

$$\mu_i = \mu_{oi} + kT \ln N_i. \quad (\text{III}, 81)$$

Эритмани идеал деб ҳисобланмайдиган юқори концентрация ҳолларида N_i зичликни a_i активлик билан алмаштириш керак, бу ҳолда

$$\mu_i = \mu_{oi} + kT \ln a_i. \quad (\text{III}, 82)$$

бўлади. Бу ерда келтирилган муносабатларни Фикнинг биринчи қонунини умумий кўринишда келтириб чиқаришда фойдаланиш мумкин. Масалан, Зайт тавсия қилган диффузия бир турдаги атомлар кўчиши билан боғланган кўринишда бўлади.

Атомнинг ҳаракатини $f_i = 1$ куч таъсири остида деб фараз қиламиз. У ҳолда диффузияланувчи атомнинг $\sigma_i f_i = -\frac{1}{N_A} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial x}$ эффектив диффузион куч таъсири остидаги ўртача тезлиги

$$\sigma_i = -\frac{u_i \partial \mu_i}{N_A \partial x} \quad (\text{III},83)$$

Агар i -таркиб атомлар зичлиги N_i га тенг бўлса, зарралар оқимини қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$j_i = N_i \cdot \frac{u_i}{N_A} \cdot \frac{\partial \mu_i}{\partial x}, \quad (\text{III},84)$$

ёки (III,82) дан фойдаланилса

$$j_i = N_i \frac{u_i}{N_A} RT \frac{\partial}{\partial x} \ln a_i. \quad (\text{III},85)$$

Активлик коэффициенти $\Upsilon_i = \frac{a_i}{N_i}$ ни киритсак,

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

Бу тенгламани Фикнинг биринчи қонуни билан таққосласак,

$$D_i = u_i kT \left(1 + \frac{\partial \ln \Upsilon_i}{\partial \ln N_i} \right). \quad (\text{III},86)$$

Қавс ичида турган ифодани диффузия коэффициентининг термодинамик кўпайтувчиси деб номлаш мумкин. Идеал эритмалар ҳолида ($\Upsilon_i = 1$) термодинамик кўпайтувчи 1 га тенг. Бунда $D = u_i kT = D_i^*$ кўп таркибли системадаги i – таркибловчининг атомлар диффузияси коэффициентидир. Умумий ҳолда

$$D_i = D_i^* \left(1 + \frac{\partial \ln \Upsilon_i}{\partial \ln N_i} \right) \quad (\text{III},87).$$

бу ерда D_i – i – таркиб кимёвий гетеродиффузия коэффициенти. Фақат идеал эритма ҳолида иккала коэффициент (хусусий атомлар диффузияси ва гетеродиффузия) ўзаро тенг.

Кўптаркибли системалардаги диффузиянинг ўзига хос томони, системанинг ҳар бир таркибловчисига хос бўлган диффузиянинг парциал коэффициентлари мавжудлигидир. Бунда ҳар бир таркибловчининг диффузия коэффициенти учун

$$D_1 = D_1^* \left(1 + \frac{\partial \ln \Upsilon_1}{\partial \ln N_1} \right), \quad D_2 = D_2^* \left(1 + \frac{\partial \ln \Upsilon_2}{\partial \ln N_2} \right). \quad (\text{III},88)$$

ифодалар ўринли. Гиббс-Дюгем муносабатига асосан, системада термодинамик кўпайтувчи.

$$\frac{\partial \ln Y_1}{\partial \ln N_1} = \frac{\partial \ln Y_2}{\partial \ln N_2}, \quad (\text{III}, 89)$$

га тенг. Бу ҳолда гетеродиффузия коэффициентлардаги фарқ хусусий атомлар диффузияси коэффициентлардаги D_1^* ва D_2^* фарқ билан асосланиши мумкин. Бу хулоса кўп таркибли системалардаги умумий диффузия ҳоллари учун ҳам ўринлидир.

Назорат саволлари

1. Панжара доимийсининг таърифи?
2. Кристалларда ковалент боғланиш қандай амалга ошади?
3. Атомларда тугунлараро диффузия механизми?
4. Энтропия ва энтальпия активлашиши энергиялари нима?
5. Кўп таркибли тизимнинг кимёвий потенциали нима?

4-БОБ. ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАРДА ДИФФУЗИЯ НАЗАРИЯСИНING АЙРИМ МАСАЛАЛАРИ

4.1. Яримўтказгичларда бирикмалар ҳосил бўлишининг киришма атомлар диффузиясига таъсири

Олдинги бобда кўриб чиқилган қаттиқ жисмларда хусусий атомлар диффузияси ва гетеродиффузия назарияси диффузияланувчи зарралар электрик заряди ва бундай ҳолда улар орасида ҳосил бўлувчи ўзаро таъсирни инобатга олмаган. Бироқ, турли киришмавий атомлар ўртасидаги бундай ўзаро таъсир, шунингдек киришмавий атом ва кристалл панжара нуқсонлари ўртасидаги ўзаро таъсир яримўтказгичларда киришма атомлар диффузиясига ҳам кучли таъсир ўтказиши мумкин. Айниқса, донор ва акцептор табиатли атомларнинг бир вақтдаги диффузияси рўй берадиган, яъни диффузияланувчи киришмавий атомларнинг қарама-қарши ишорали электрик зарядга эга бўлган ҳолати қизиқиш уйғотади. Бундай ионлар орасидаги Кулон ўзаро таъсир метастабил ҳаракатли ток ташувчиларнинг бирикмалар ҳосил бўлишига олиб келиши, улар эса ўз навбатида диффузия тезлигининг ўзгартириши ва яримўтказгичларда диффузияланувчи атомларни сочилишига олиб келади.

Бирикмаларнинг ҳосил бўлиши панжаранинг эластик деформацияси натижасида ҳам юзага келиши мумкин, бунинг учун бу деформацияни ҳосил қилувчи киришма атомларнинг яқинлашиши ва бирикмалар ҳосил қилиши талаб қилинади. Яримўтказгичларда киришма атомлар диффузияси ўзаро таъсир ва бирикма ҳосил қилиш жараёнлари назарияси Рейс, Фуллер, Морин томонидан кўриб чиқилган.

Донор атомлар диффузияси рўй бераётган ковакли яримўтказгични кўриб чиқамиз. N_a -ҳажм бўйлаб текис тақсимланган акцептор табиатли киришма атомлар $N_d(x)$ – зичлик x -нуқтадаги донорлар зичлиги, $P(x)$ – жуфт-жуфт боғланган N_a^b ва N_d^h ионлар концентрацияси, эркин донорлар зичлиги эса $N_d - P$ бўлади. Бу ҳол учун Фик қонуни ўринли деб ҳисоблаб, диффузияланувчи ионлар оқимини қуйидагича ёзиш мумкин:

$$j = -D_0 \frac{\partial(N_d - P)}{\partial x}, \quad (\text{IV},1)$$

D_0 – эркин донорлар диффузия коэффиценти (бирикма ҳосил бўлмаганда).

Эркин ва боғланган ионлар динамик мувозанатда деб ҳисоблаб, таъсирлашувчи массалар қонунидан фойдаланиб, $P(x)$ ни N_a ва N_d орқали ифодалаш мумкин.

$$\frac{P}{(N_a - P)(N_d - P)} = K(T), \quad (IV,2)$$

бу ерда $K(T)$ зичликка боғлиқ эмас, ва фақат температура функциясидир. Бир қанча ўзгартиришлардан сўнг

$$(N_d - P) = \frac{1}{2} \left[N_d - N_a - \frac{1}{K(T)} \right] + \sqrt{\frac{\left[N_a - N_d + \frac{1}{K(T)} \right]^2}{4}} + \frac{N_d}{K(T)}, \quad (IV,3)$$

ни оламиз. (IV,3) ни (IV,1) га қўйиб қуйидагини топамиз:

$$j = -D \frac{\partial N_a}{\partial x}, \quad (IV,4)$$

бу ерда,

$$D = \frac{D_o}{2} \left[1 + \frac{\frac{1}{2} \left(N_d - N_a + \frac{1}{K(T)} \right)}{\sqrt{\frac{1}{4} \left(N_d - N_a - \frac{1}{K(T)} \right)^2 + \frac{N_d}{K(T)}}} \right], \quad (IV,5)$$

Шундай қилиб, донор ва акцепторли киришмалар орасида бирикмалар ҳосил бўлиш вақтида диффузия коэффиценти-донор ва акцепторлар зичлик функцияси, шунингдек мувозанат доимийси бўлиб хизмат қилади (бирикма ҳосил бўлишдаги эркин энергия).

Икки хусусий ҳолларни кўриб чиқамиз.

1. $N_d = N_a$. у ҳолда (IV,5) дан

$$D = \frac{D_o}{2} \left[1 + \frac{\frac{1}{2K(T)}}{\sqrt{\frac{1}{4K^2(T)} + \frac{N_a}{K(T)}}} \right], \quad (IV,6)$$

келиб чиқади. Бу ердан:

$$N_a - P + \frac{1}{2K(T)} = \sqrt{\frac{1}{4K^2(T)} + \frac{N_a}{K(T)}}, \quad (IV,7)$$

(IV,7) нинг чап томонини (IV,6) га қўйсак,

$$D = \frac{D_o}{2} \left[1 + \frac{1}{2(N_a - P)K(T) + 1} \right], \quad (IV,8)$$

ни оламиз.

(IV,8) дан $K(T)$ ни олиб ташлаб ва (IV,2) дан фойдаланиб, донорлар ва акцепторлар диффузия коэффициентининг ассоциация даражаси орасидаги қуйидаги боғлиқликка келамиз:

$$D = \frac{D_0}{2} \left(1 + \frac{N_a - P}{N_a + P} \right). \quad (\text{IV},9)$$

Юқори даражадаги ассоциацияда, $P \approx N_a$ бўлганда

$$D = \frac{D_0}{2} \quad (\text{IV},10)$$

2. $N_d \ll N_a$. Бу ҳолда, (IV,5) даги N_d ни N_a га нисбатан ҳисобга олмасак,

$$D = \frac{D_0}{1 + K(T)N_a}. \quad (\text{IV},11).$$

$K(T)$ N_a юқори ассоциация вақтида қўрилатган сатҳда катта қийматга эга бўлгани учун, бу D нинг кескин камайишига олиб келади.

Яримўтказгичлардаги атомлар диффузиясига бирикма ҳосил бўлишининг таъсири В.Васкин ишларида ҳам кўриб чиқилган. У томонидан, 2 хил киришма атомлари учун диффузия тенгламасининг тақрибий ечими баъзи чегаравий шартлар учун, шунингдек кучли бирикма ҳосил қилиш холи учун ҳам топилган ($K=0$). Бу ечимлар атомларнинг концентрацион тақсимланиши учун қуйидаги аналитик ифодаларга олиб келди (бирикмалар диффузия коэффициенти алоҳида таркибловчи диффузия коэффициентларига нисбатан кичик деб фараз қилинганда).

1. А-киришманинг N_{AO} доимий манбадан В киришма билан бир N_{BO} турда легирланган сатҳгача В яримўтказгичга диффузияси, (киришмавий буғланиш йўқлигида). Кучсиз бирикма ҳосил бўлиши ҳолида

$$N_A N_{AO} \left(1 + \frac{N_{BO}}{K(T)} \right) \operatorname{erfc} \frac{\lambda}{\sqrt{1 + \frac{N_{BO}}{K(T)}}}, \quad (\text{IV},12).$$

бу ерда $\lambda = \frac{x}{2\sqrt{D_A t}}$,

$$N_B = N_{BO} \left[1 - \frac{N_{AO}}{K} \left(\frac{d}{d^2 - 1} \operatorname{erfc} \lambda d - \frac{1}{d^2 - 1} \operatorname{erfc} \lambda \right) \right], \quad (\text{IV},13).$$

бу ерда $d^2 = \frac{D_A}{D_B}$. 15-расмда ечимнинг кўриниши тасвирланган.

Шундай қилиб, бирикма ҳосил қилиш А киришма эрувчанлигини оширади ва унинг диффузия коэффицентини камайтиради. Шу билан бир вақтда чегарада В киришма зичлиги ортади, $N_B(o) = N_{BO} \left(1 + \frac{N_{AO}}{K(d+1)} \right)$ ва λ_o нуқтада В киришма тақсимланишининг d билан боғлиқ ҳолда энг паст зичлиги ҳосил бўлади,

$$\lambda_o^2 = \frac{2 \ln d}{d^2 - 1} \quad (\text{IV}, 14)$$

2. Доимий N_{AO}, N_{BO} манбалардан А ва В киришмаларни бир вақтда диффузиялари $d=1$ ҳолда

$$N_A = N_{AO} \left[1 + \frac{N_{BO}}{K} \left(\operatorname{erfc}^2 \lambda - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \lambda \exp(-\lambda^2) \operatorname{erfc} \lambda - \frac{2}{\pi} \exp(-2\lambda^2) + \frac{2}{\pi} \operatorname{erfc} \lambda \right) \right], \quad (\text{IV}, 15)$$

$$N_B = N_{BO} \left[1 + \frac{N_{AO}}{K} \left(\operatorname{erfc}^2 \lambda - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \lambda \exp(-\lambda^2) \operatorname{erfc} \lambda - \frac{2}{\pi} \exp(-2\lambda^2) + \frac{2}{\pi} \operatorname{erfc} \lambda \right) \right], \quad (\text{IV}, 16)$$

$d \ll 1$ ҳолда

$$N_A = \frac{N_{BO} N_{AO}}{K} \left[\left(1 - \frac{4d}{3\pi} \right) \operatorname{erfc} \lambda - \frac{3\lambda}{\sqrt{\pi}} \exp(-\lambda^2) + \frac{4d}{3\pi} (\lambda^2 + 1) \exp(-\lambda^2) \right], \quad (\text{IV}, 17)$$

$$N_b = \frac{N_{BO} N_{AO}}{K} \left[\left(1 - \frac{2\lambda d}{\sqrt{\pi}} + d^2 \right) \operatorname{erfc} \lambda - d^2 \operatorname{erfc} \lambda d \right], \quad (\text{IV}, 18)$$

3. Кучли бирикма ҳосил бўлишнинг чегаравий ҳолати (битта киришма бирикма билан деярли, тўлиқ боғланган). Киришма А нинг доимий манба N_{AO} дан N_{BO} даражада В киришма билан легирланган яримўтказгичга диффузияланишида ва унинг бўғланиши йўқлигида

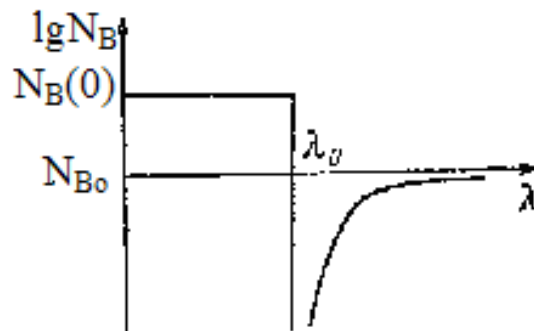
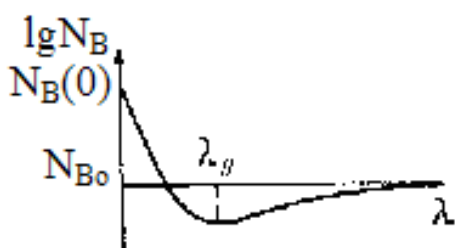
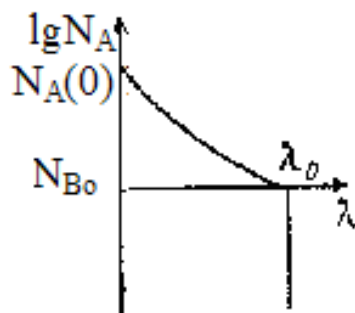
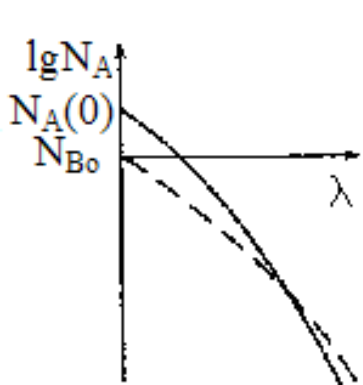
$$N_A = N_{B1} + N_{AO} \left(1 - \frac{\operatorname{erfc} \lambda}{\operatorname{erfc} \lambda_o} \right) \quad \lambda < \lambda_o, \quad N_A = 0 \quad \lambda > \lambda_o, \quad (\text{IV}, 19)$$

$$N_B = N_{B1} \quad \lambda < \lambda_o, \quad N_B = N_{BO} \left(1 - \frac{\operatorname{erfc} \lambda d}{\operatorname{erfc} \lambda_o d} \right) \quad \lambda > \lambda_o, \quad (\text{IV}, 20)$$

бу ерда

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

(IV, 19) ва ((IV, 20) ларнинг сифат жиҳатдан кўриниши 16-расмда кўрсатилган.



15-расм. Кучсиз бирикма ҳосил бўлганда A ва B киришмалар тақсимоти

16-расм. Кучли бирикма ҳосил бўлганда A ва B киришмалар тақсимоти

Кучсиз бирикма ҳосил қилиш ҳолатидагидек, бу ерда ҳам A киришма сирт зичлиги катталигининг ортиши кузатилади. Шу билан бир вақтда B киришма чегара зичлигининг ортиши бирикма ҳосил бўлиши соҳасига ўтиши ҳисобига рўй беради. Бироқ, суст бирикма ҳосил бўлиш ҳолатида A киришманинг концентрацион тақсимланиш кескинлигининг ортиши ва B киришманинг концентрацион тақсимланишида минимум кузатилса, кучли бирикма ҳосил бўлишида, $K=0$ да, концентрацион тақсимот A киришманинг λ_0 нуқтада кескин узилиши, B киришманинг концентрацион тақсимоти учун ҳам рўй беради.

Шундай қилиб, бирикма ҳосил бўлиш мавжудлигида диффузия тенгламасининг ечимини математик таҳлилининг кўрсатишича, бирикма ҳосил бўлиши, биринчидан, бирикма ҳосил бўлиш соҳасида киришманинг умумий зичлигининг ортишига ва ёндош соҳада унинг зичлиги пасайишига олиб келса, иккинчидан, киришманинг диффузион тақсимланишининг кўринишини ўзгартиради. Киришмалардан бирининг бир текис тақсимланишида бирикма ҳосил бўлиши шу киришманинг концентрацион тақсимланишида унинг доимийси ва иккала киришманинг диффузия коэффицентлари нисбатига боғлиқ бўлган минимумни пайдо бўлишига олиб келади,

Яримўтказгичлардаги диффузияга бирикмалар ҳосил бўлишининг таъсири киришма зичлиги юқори даражада бўлган ҳолларда ва бирикма ҳосил қилиш энергиясининг юқори қийматлари, айниқса, катта аҳамиятга эга. $N_{AB} \gg K$ ҳолда қилинган

ҳисобларни кўрсатишича, бирикма ҳосил қилиш сезиларли бўлиши ҳарорат, 1000°K дан юқори бўлиши зарурдир. Киришма зичлиги 10^{-4} - 10^{-2} да бирикма ҳосил қилиш энергияси 0,4-1 эВ тартибида бўлиши керак.

Юқорида айтиб ўтилганидек, бирикма ҳосил бўлишини эътиборга олган ҳолда диффузион тенгламани ечишда, бирикмаларнинг диффузия коэффиценти эркин киришма атомлар диффузия коэффицентиға нисбатан кичик, шунинг учун бирикмалар диффузияси эътиборга олинмаган. Бироқ, бирикманинг диффузия коэффиценти эркин киришма атомлар диффузия коэффицентидан юқори бўлган ҳоллар ҳам бўлиши мумкин. Бундай ҳолат диффузиянинг вакансион механизмида рўй бериши мумкин, яъни диффузияланувчи киришма ва вакансия электростатик ўзаро таъсир натижасида ҳосил бўлган ҳол. Бундай бирикма ҳосил қилиш вакансияларни диффузияланувчи киришма атомларига «тортса» (вакансиянинг атом яқинида туриш эҳтимолини кўпайтиради) ва демак, киришма атомининг диффузия коэффиценти ортишиға ва вакансиялар орасида бирикмалар ҳосил бўлишиға (дивакансия, тривакансия) олиб келади. Бунда потенциал тўсиқ камайиши натижасида вакансияларнинг диффузия коэффиценти ортади ва уларнинг силжиш эҳтимоли ҳам ортади.

4.2. Ички электр майдонларининг диффузияға таъсири

Яримўтказгичларда киришма ионлар диффузиясига уларда маҳаллий электростатик диффузион потенциаллар туфайли ҳосил бўладиган электр майдонда ионлар дрейфи ҳам қўшилади. Бундай электр майдон, масалан, электрон-ковакли ўтишларда, шунингдек киришма ионларининг нотекис тақсимлаган жойларида мавжуд бўлади.

Ички электр майдоннинг диффузияға таъсирини ҳисобға олиш зарурияти биринчи марта Бардин, Браттайн ва Шокли томонидан айтилган. Кейинчалик, Ресйс, Фуллер ва Морин, шунингдек, Смит томонидан бу ғояни германий ва кремнийдаги киришма диффузиясига қўллаш таклифи ривожлантирилган.

Ички электр майдон содда ҳолда киришманинг бир жинсли яримўтказгичға диффузияланиши жараёнининг ўзидаёқ юзаға келади. Бу майдоннинг юзаға келиш сабаби диффузиянинг амбиполярилик хоссаси ва ҳаракатланаётган ионлар ҳамда шу туфайли ҳосил бўлган ток ташувчилар (электронлар ва коваклар). орасидаги диффузия коэффицентларининг фарқидир. Ток ташувчи заррачалар диффузияланувчи ионларға нисбатан каттароқ диффузия коэффицентига ва қарама-қарши ишорали электр зарядига эға, шунинг учун улар ўз ҳаракатларида ионлардан илгарилаб кетадилар. Бу эса, ионлар

харакатини тезлаштирувчи ва ток ташувчилар харакатини секинлаштирувчи электр майдонини юзага келтиради.

Майдон кучланганлиги E икки оқим тенглиги шартидан келиб чиққан ҳолда топилиши мумкин, масалан, j_a акцептор ионлар оқими ва коваклар оқими j_p .

$$j_a = -D_a \left(\frac{\partial N_a}{\partial x} + \frac{N_a e E}{kT} \right), \quad (IV,21)$$

$$j_p = -D_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{p e E}{kT} \right), \quad (IV,22)$$

Бу ерда D_a , D_p , N_a , p —мос равишда акцептор ионлар ва ковакларнинг диффузия коэффициентлари ва акцептор ионлар ва коваклар зичлиги; e —электрон заряди.

Нейтраллик шартидан $p = N_a + n$ ва $np = n_i^2$ муносабатни ҳисобга олиб (n_i — хусусий ток ташувчилар зичлиги) кучланганликнинг ўртача қиймати учун қуйидаги ифодани оламиз.

$$\bar{E} = \frac{kT}{e N_a} \frac{\partial N_a}{\partial x}. \quad (IV,23)$$

(IV,23) ни (IV,21) га қўйиб

$$j_a = -D_a^* \frac{\partial N_a}{\partial x}, \text{ ни оламиз } (IV,24)$$

бу ерда $D_a^* = 2D_a$. D_a^* —эффектив диффузия коэффициенти, D_a —зичлик градиенти йўқлигида киришманинг диффузион силжишини билдирувчи характерли диффузия коэффициенти (масалан, изоконцентрацион диффузияда)

Заромб нисбатан умумий масалани кўриб чиқди. Бунда градиентли электр майдон бошланғич материалда бошқа киришманинг нотекис тақсимланиши натижасида ёки донор ва акцептор табиатли киришма атомнинг бир вақтдаги диффузияси рўй берган ҳолларда юзага келади: Бу ҳолда

$$j_d = -D_d \left(\frac{\partial N_d}{\partial x} + \frac{N_d e E}{kT} \right), \quad (IV,25)$$

$$j_a = -D_a \left(\frac{\partial N_a}{\partial x} + \frac{N_a e E}{kT} \right), \quad (IV,26)$$

$$j_n = -D_n \left(\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{n e E}{kT} \right), \quad (IV,27)$$

$$j_p = -D_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{p e E}{kT} \right), \quad (IV,28)$$

Бу системадан электр ток йўқлиги шароитида, яъни $j_d + j_p = j_a + j_n$ ва нейтраллик шартини ҳисобга олиб ҳамда $np = n_i^2$ муносабатни эътиборга олган ҳолда, электр майдон кучланганлигининг ўртача қийматининг тақрибий ифодасини оламиз:

$$\bar{E} \approx \frac{kT}{2n_i e} \left(\frac{\partial N_d}{\partial x} \pm \frac{\partial N_a}{\partial x} \right). \quad (\text{IV},29)$$

Манфий ва мусбат ишоралар бир хил ва қарама-қарши йўналтирилган акцепторлар ва донорлар зичликлари градиентларига мос келади.

(IV,29) ифодадан кўриниб турибдики, бир хил йўналтирилган акцепторлар ва донорлар зичликлари градиентлари туфайли ҳосил бўлган майдони бир турдаги диффузияланувчи киришма атомлар зичлик градиенти туфайли ҳосил бўлган ички электр майдонига нисбатан кичик ва у майдонга нисбатан қарама-қарши томонга йўналган бўлиши мумкин. Бундай майдон диффузияланувчи киришманинг ҳаракатини секинлатади. Аксинча, донор ва акцепторларнинг қарама-қарши йўналган градиентларидан ҳосил бўлган электрик майдон, ҳамиша битта диффузияланувчи киришма градиентидан ҳосил бўлган электрик майдондан катта бўлади ва шунинг учун у диффузияни тезлатади. n_i нинг ортиши натижасида температура кўтарилиши билан электр майдон камайиб боради, $n_i \gg N_d$ ва $n_i \gg N_a$ бўлганда у йўқолади.

(IV,29) формуладаги $\bar{E}$ ни (IV,25) ва (IV,26) га қўйиб,

$$j_a = -D_d^* \frac{\partial N_d}{\partial x}, \quad (\text{IV},30)$$

$$j_a = -D_a^* \frac{\partial N_a}{\partial x} \quad (\text{IV},31)$$

ифодаларни оламиз. Бу ерда

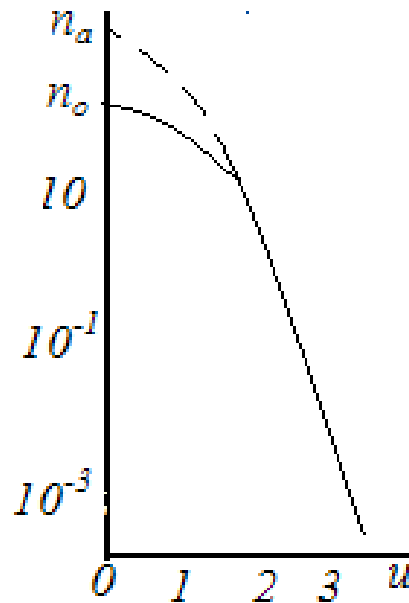
$$D_d^* = D_d \left[\left(1 + \frac{N_d}{2n_i} \right) \pm \frac{N_d}{2n_i} \frac{\partial N_a}{\partial x} / \frac{\partial N_d}{\partial x} \right], \quad (\text{IV},32)$$

$$D_a^* = D_a \left[\left(1 + \frac{N_a}{2n_i} \right) \pm \frac{N_a}{2n_i} \frac{\partial N_d}{\partial x} / \frac{\partial N_a}{\partial x} \right], \quad (\text{IV},33)$$

D_d^* ва D_a^* мос равишда эффектив диффузия коэффициентлари бўлиб, бир жинсли бўлмаган яримўтказгичларда градиентли ионланган электр майдонлар мавжудлигида ион, донор ва акцепторлар диффузияланади.

Эффектив диффузия коэффициентлари D_d^* ва D_a^* диффузияланувчи киришма атомлар зичлигига, киришма атомлар зичлик градиентлари нисбатларига, шунингдек хусусий ток ташувчилар зичлигига боғлиқ. Температура ортиши билан, n_i кескин ўсганда

ва $E \rightarrow 0$ бўлганда, D_d^* ва D_a^* лар D_d ва D_a қийматлари бир жинсли яримўтказгичлардаги донор ва акцепторларнинг диффузия коэффициентларига яқинлашади.



17-расм. Концентрацион эгри чизиклар. Штрих чизик erfc функция, узлуксиз чизик-ички электр майдонини ҳисобга олингандаги тақсимот

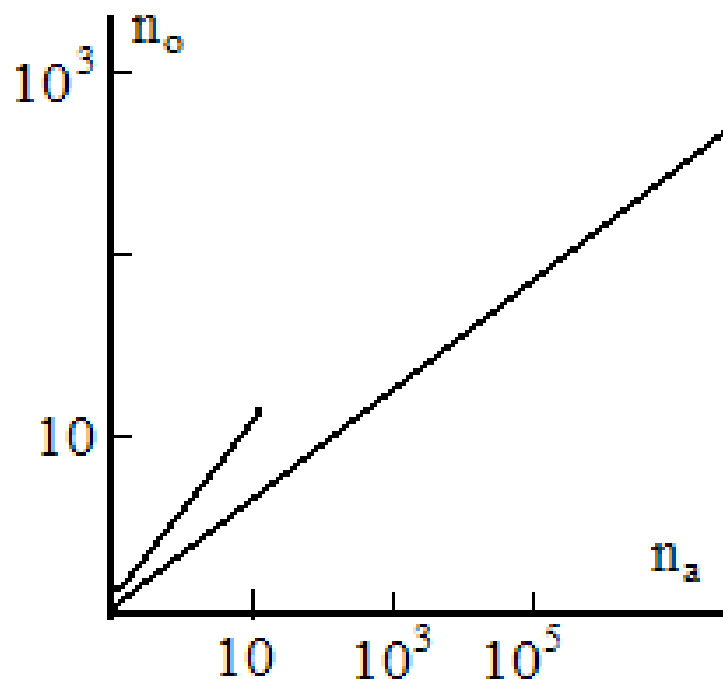
Дастлабки ишларда бажарилган градиентли электр майдонларининг диффузияга бўлган таъсирини таҳлили асосан сифат характериға эға ва майдон мавжудлигида юзаға келувчи концентрацион тақсимланишни миқдор жиҳатдан баён этиш имконини бермайди. Леховек ва Слабодский хусусий яримўтказгичда киришманинг диффузион тенгламаси ечимини топдилар. Бу ҳолда диффузион тенглама қуйидаги кўринишға келтирилади:

$$n + (n^2 + 4)^{1/2} + k_1 = k_2 \int du \exp \left\{ - \int \frac{2udu}{1+F} \right\}, \quad (\text{IV}, 34)$$

бу ерда

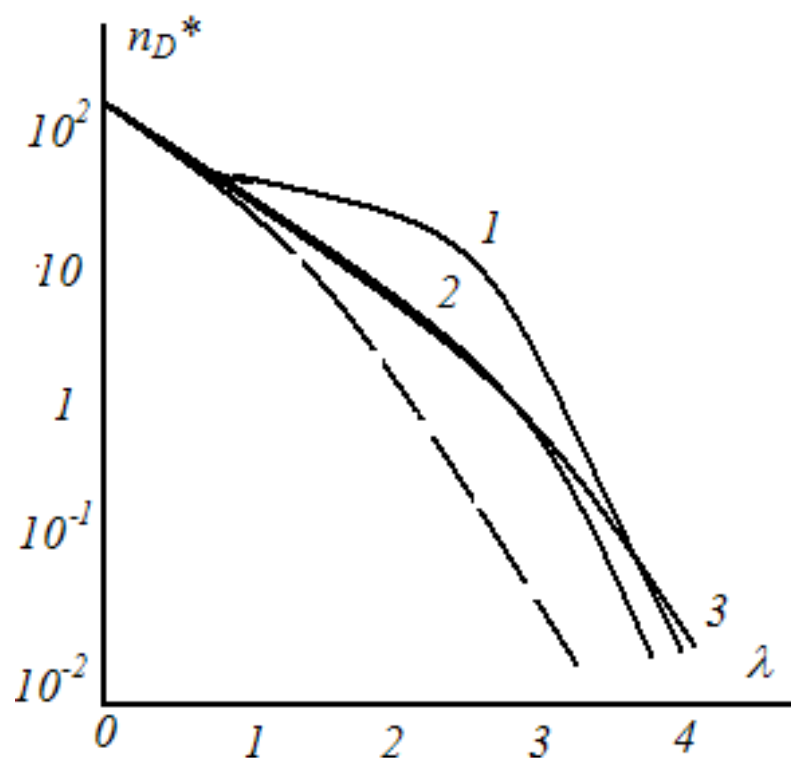
$$n = \frac{N_a}{n_i}, \quad u = \frac{x}{(2Dt)^{1/2}}, \quad F = \frac{n}{(n^2 + 4)^{1/2}},$$

k_1 ва k_2 -чегаравий шартлардан аниқланувчи интеграллаш доимийлари.

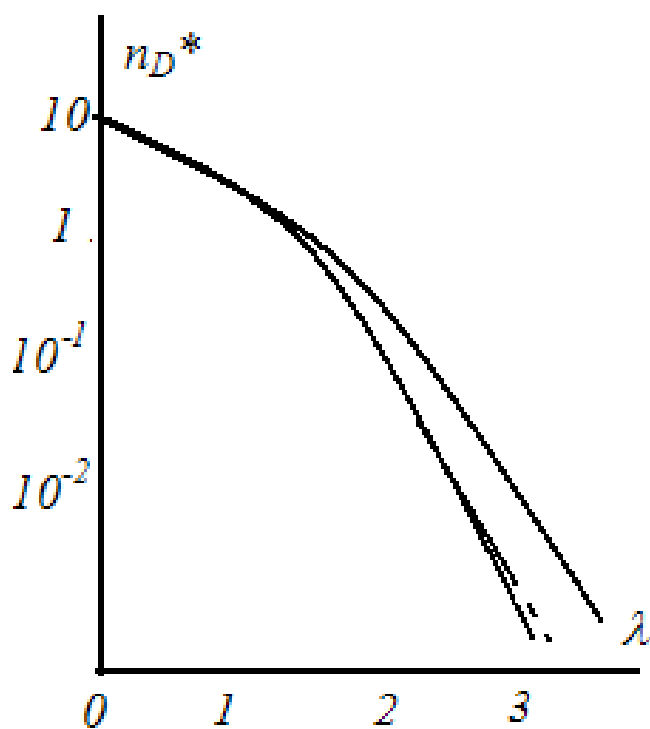


18-расм. n_o нинг n_a га боғлиқлиги. Штрих чизиқ- майдон бўлмаганда.

(IV,34) тенглама ечимининг турли қийматлари учун 0,5 дан 3,0 гача интервалда бажарилди. 17-расмда концентрация тақсимои $u=2$ бўлгандаги ҳолат кўрсатилган. Кўриниб турибдики, $erfc$ функция зичликнинг ҳақиқий кўриниши $n \ll 1$ интервалда мос келади, $erfc$ функция орқали ифодаланган концентрацион тақсимои $u=0$ қийматга экстраполяция қилиб (яъни чегара сирти $x=0$) да олиб, 18- расмда график шаклда кўрсатилган «эхтимолий» сиртий зичлик n_a ни аниқлаш мумкин.



19-расм. $n_{D0}=100$, $p_A=10(1)$ ва $1(2)$, $\operatorname{erfc} \lambda \sqrt{2}$ -функцияси

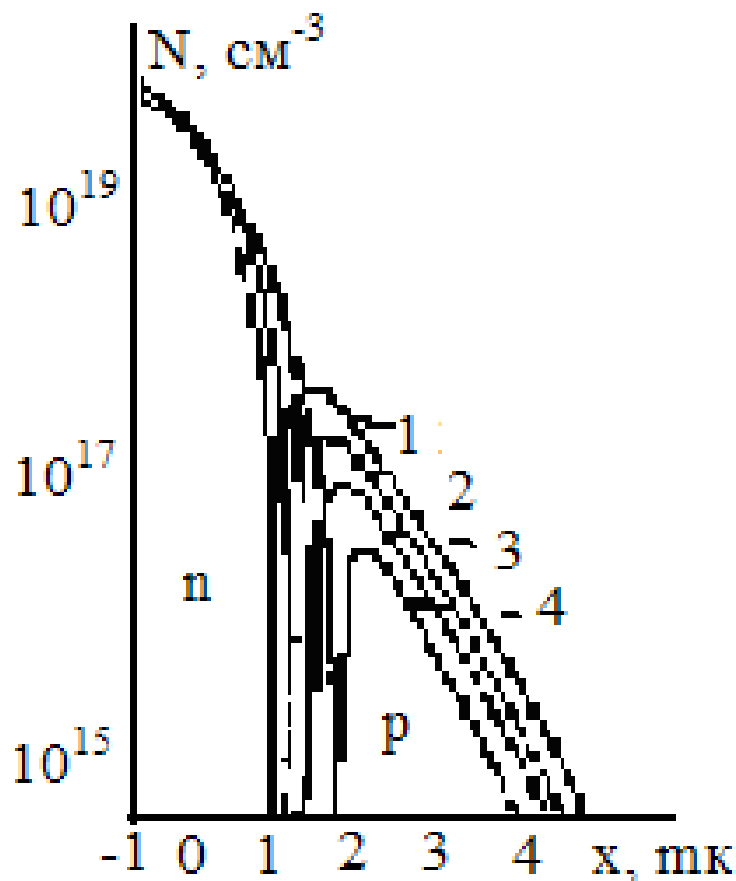


20-расм. $n_{A0}=10$ ва $p_A=1(1)$ ва $\operatorname{erfc} \lambda \sqrt{2}$ -функцияси (2).

Шоу ва Уэллс ишларида яримўтказгичдаги донорларнинг акцепторлар билан вақтда легирланган диффузияси кўриб чиқилган. Диффузион тенгламани тақрибан

интеграллаш ЭХМда амалга оширилган. 19- ва 20-расмларда олинган концентрацион тақсимотларнинг баъзи бирлари кўрсатилган.

Клейн ва Бил ишларида ЭХМ ёрдамида қарама-қарши ишорали киришмаларнинг бир вақтдаги диффузияларини ифодаловчи тенгламалар системаси интегралли ҳисобланган. n_i нинг турли қийматлари учун олинган натижалар 21-расмда келтирилган. Бу расмдан кўриниб турибдики, N_D/n_i қийматларининг ўсиши билан ички электр майдоннинг диффузияланувчи киришма атомларга таъсири кескин ортади.



21-расм. Компенсирланмаган киришмалар таҳсимоти

В.В.Васкин ишларида тўлиқ ва узвий равишда диффузион тенгламалар системаси ва Пуассон тенгламасини бирга ечиш асосида диффузияга ички электр майдонларнинг таъсири кўрсатилган.

Турлича усуллар билан (ўрта майдон усули, ЭХМ даги сонли усул, вариацион усуллар) бир таркибли диффузия учун турлича чегаравий шароитда диффузия тенгламасининг тақрибий ечимлари олинган, шунингдек икки киришманинг бир вақтда ва кетма-кет диффузияси учун диффузия тенгламаси аналитик ечимининг сонли яқинлашуви олинган.

4.3 Бир таркибли диффузия

Кўзғотилмаган хусусий яримўтказгичга бир таркибли диффузия қилиниши холи учун диффузион тенглама қуйидагича ёзилади:

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \text{div}(\nabla n + zn \nabla \varphi), \quad (\text{IV}, 35)$$

бу ерда

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

Бунда тўла оқим учун қуйидагича ифода ҳосил бўлади:

$$j = - \left(1 + \frac{nz^2}{\sqrt{n^2 z^2 + 4}} \right) \nabla n. \quad (\text{IV}, 36)$$

Бу ерда $n = \frac{N}{n_i}$, N -киришма атомлар зичлиги, z -унинг заряди (электрон заряди бирлигида), $\tau = Dt$, $\varphi = \frac{1}{4} e \varphi_0$, φ_0 – ички майдон потенциали.

Бу ҳолда (IV,36) дан кўриниб турибдики, диффузион оқим, $1 + \frac{nz^2}{\sqrt{z^2 n^2 + 4}}$ марта ортади. Бунда оқим $(1+z)$ мартадан ортиқ кўпая олмайди (яъни майдон тўйинишга интилади).

Бу эса катта концентрацияли соҳаларда ($n > 1$) киришма атомлар кичик зичлик ($n < 1$) соҳаларига қараганда тезроқ диффузияланишига олиб келади, худди шу концентрацион тақсимот боғланиши кескинлиги ортишини келтириб чиқаради.

Киришма атомларнинг бир тур атомлар билан легирланган яримўтказгичга диффузияланиш ҳолатида, диффузион оқим учун тенглама қуйидаги кўринишга эга бўлади:

$$j = - \left[1 + \frac{z^2 n}{\sqrt{(zn \pm z_1 p)^2 + 4}} \right] \nabla n, \quad (\text{IV}, 37)$$

бу ерда z , z_1 зарядлар, n ва p киришма зичликлари (n_i бирлигида). Агар z ва z_1 бир ишорали бўлса, хусусий яримўтказгичга киришма атомлар диффузиясига ўхшаш ҳолат бўлади. Ўша ишорали киришма билан олдиндан легирланган фақат электр майдоннинг камайишига, яъни оқим камайишига олиб келади.

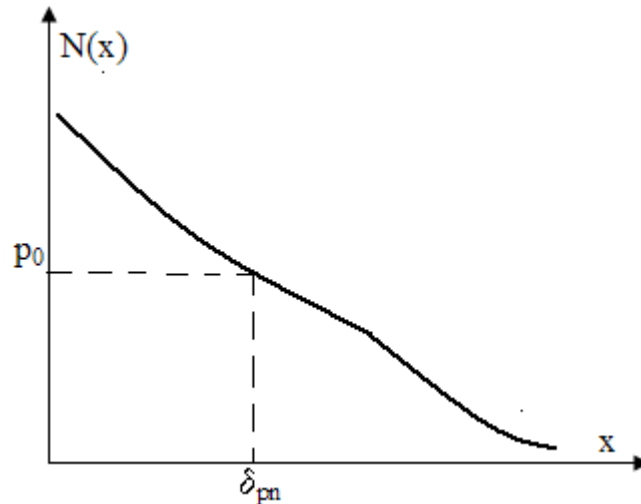
Агар z ва z_1 қарама-қарши ишорали бўлса p - n ўтиш юзага келади, яъни $zn + z_1p = 0$ бўлади, бу жойда майдон максимумга етади

$$E_{p-n} \approx -\frac{z}{2} \nabla n, \quad (\text{IV}, 38)$$

оқим бу жойда

$$j \approx -\frac{n_0 z^2}{2} \nabla n, \quad (\text{IV}, 39)$$

қўшни соҳадаги градиентли оқимни анча оширади.



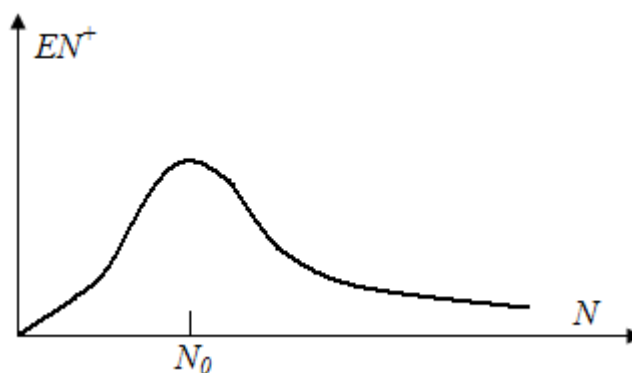
22-расм. p - n ўтиш мавжудлигида n -киришмалар тақсимоти

Бу оқимнинг ортиши p - n ўтишда киришма зичлик градиентининг камайишига олиб келади ва етарли даражада юқори зичликда ($p \gg 1$), p - n ўтиш соҳасида киришма атом тақсимланишида поғона пайдо бўлиши мумкин (22-расм).

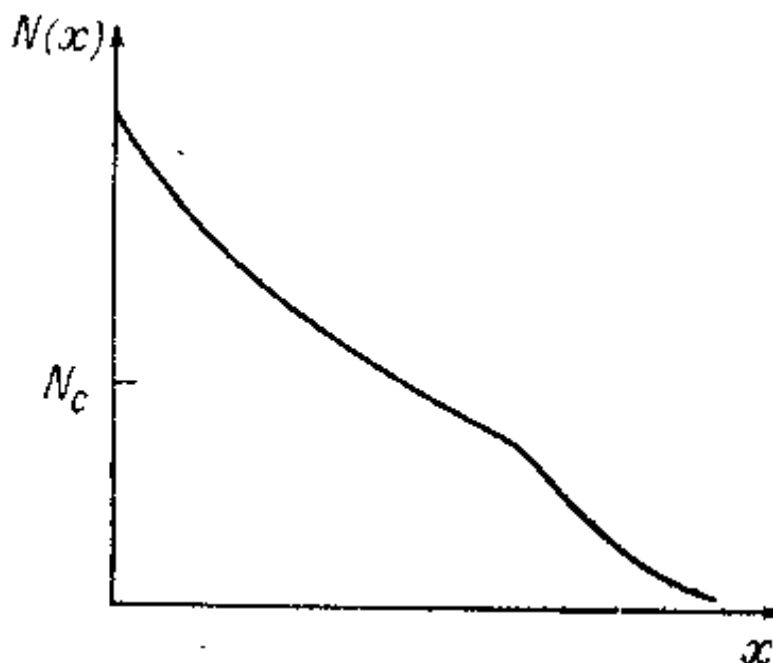
Шундай қилиб, диффузияланувчи киришма атом концентрацион тақсимотини ўзгартирилса, дрейфли оқим (ички майдон ҳисобига) градиентли диффузион оқимдан анча устун бўлади.

Тўла ионлашмаган уйғонган яримўтказгичларда киришма атомлар дрейф оқими градиент оқимидан анча кичик бўлади. Диффузияланган киришма атомлар зичлигининг камайиши билан (ионланган киришма атомлар миқдори ортгани сабабли) майдон оқими ўсади, у эса умумий оқим ортишига олиб келади. Бирок, ички майдон қуввати кучланганлик камайиши боис зичликнинг янада камайишида— электр майдон оқими камайишни бошлайди). Шундай қилиб, ички майдон оқимининг диффузияланувчи атомлар зичлигига боғлиқлиги максимумли эгри чизик кўринишига эга бўлади (23-расм).

Концентрацион тақсимотда бу ҳолат поғоналарнинг пайдо бўлишига олиб келади (24-расм).



23-расм. Ички майдон оқимининг диффузияланувчи киришма атомлари концентрациясига боғлиқлиги N -валент соҳадаги кавакларнинг ҳолат зичлиги



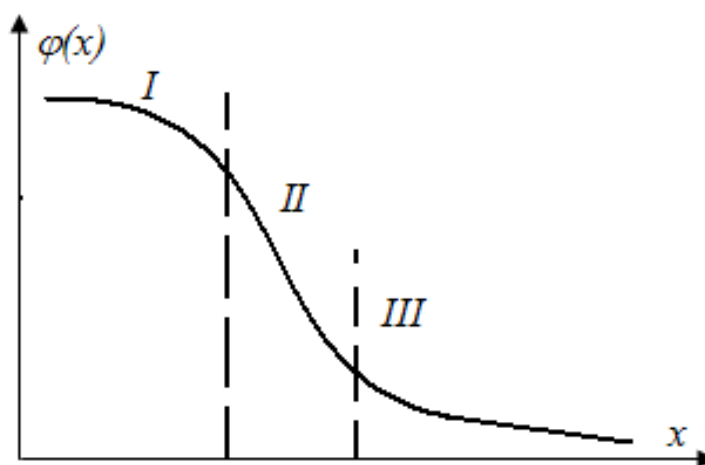
24-расм. Уйғониш мавжудлигида киришма атомлари тақсимооти

4.4 Кўп таркибли диффузия

Кўп таркибли диффузия ҳолида киришманинг майдон оқими фақатгина ички электр майдонининг градиентигина эмас, балки, бошқа киришма атомлар градиентларига ҳам боғлиқ. Бунда секин диффузияланадиган киришма атомлари кристалнинг кам концентрацияли соҳасида жойлашиши мумкин, секин диффузияланувчи киришма атомларнинг маълум бир жойга тўпланиши, кристалнинг бу соҳасида ички электр майдони оқими киришма атомлар градиенти оқимидан ортиб кетишига олиб келиши мумкин ва у диффузияланувчи киришма атомлар градиенти бўйлаб ва қарама-қарши ҳам йўналган бўлиши мумкин. Бутун кристалл бўйлаб диффузион оқимнинг узлуксизлиги

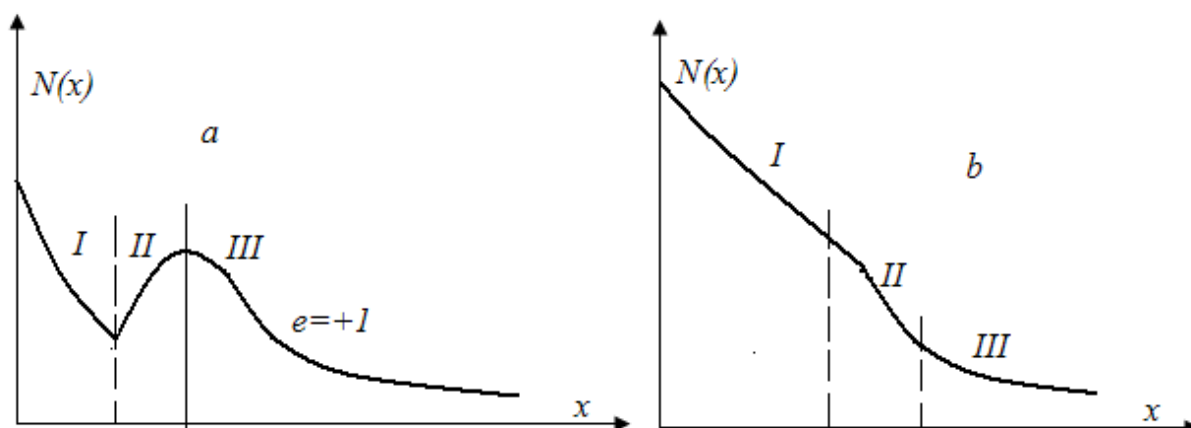
шарти бажарилиши лозимлиги сабабли, маҳаллий электр майдони мавжудлиги бу соҳада диффузияланувчи киришма атомлар микдорининг ўзгаришига олиб келади.

Фараз қилайлик, (25-расм) II соҳада секин диффузияланувчи киришма атомлар зичлик градиенти ҳосил қилган кучли ички майдон бор. Ички майдон йўналиши кўрилатган киришма атомлар диффузияси йўналиши билан мос келадиган ҳолни кўриб чиқамиз. Бунда II соҳада киришма атомлари оқими асосан майдон билан I ва III соҳаларда – диффузион оқим билан аниқланади II соҳада киришма атомлари оқими атомлар зичлиги градиенти ҳисобига бўлгани учун оқимнинг узлуксизлиги ҳисобига II ва III соҳалар чегарасида атомлар зичлиги ортади.



25-расм. $\varphi(x)$ потенциал тақсимоти

Бошқа томондан, I соҳада зичлик градиенти ортиши, II соҳага киришма оқими катталиги билан белгиланади, ўз навбатида I ва II соҳа чегарасида зичлик камаяди (26-расм, а).



26-расм. II сохада кучли майдон мавжудлигида киришма атомлари тақсимотининг сифат характери. а-майдон йўналиши диффузия йўналиши билан бир хил, б-тескари йўналишида

Юқорида баён қилинган таҳлиллар асосида қуйидаги хулосага келиш мумкин: ички майдон йўналиши диффузия йўналишига қарама-қарши бўлган– (26-расм, б) да расмда кўрсатилган тарзда берилган атомлар зичлиги тақсимои юзага келади. Бунда зичликларнинг соҳалар чегарасидаги ўзгарувчанлиги тескари бўлади:

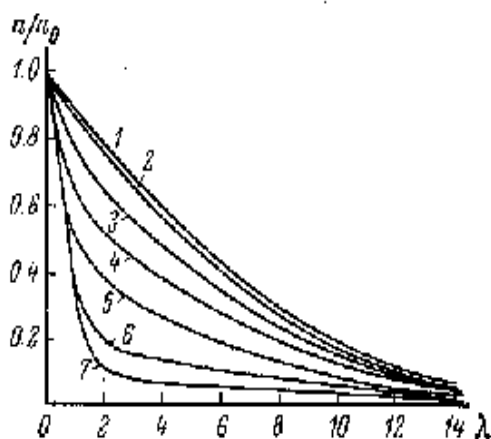
$$n_{I,II} > n_{II,III}$$

В.В.Васкин ишида икки киришманинг бир вақтдаги ёки кетма-кет диффузияси холлари учун масаланинг аналитик ва сонли ечими берилган. Математик ҳисоб-китоблар жуда мураккаблиги боис, биз фақат олинган натижаларнинг сифат баёни ва графиклар тасвири билан чегараланамиз. Олдин, $D_1 \gg D_2$ бўлганда турлича диффузия коэффициентига D_1 ва D_2 эга бўлган икки хил киришманинг бир вақтдаги диффузиясининг миқдорий ва аналитик ечимини келтирамиз. Больцман сони $\lambda = \frac{x}{2\sqrt{D_1 t}}$

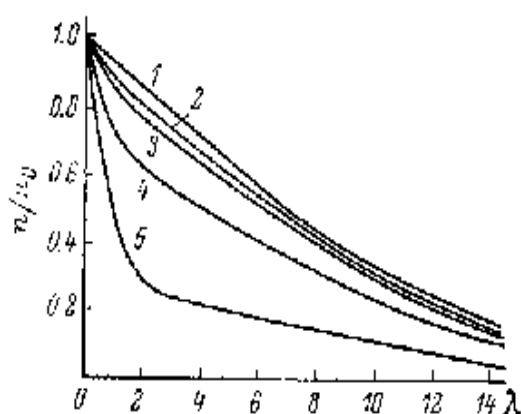
бўлганда диффузия тенгламаси қуйидагича ёзилади:

$$\frac{d^2 n}{d\lambda^2} + 2\lambda d^2 \frac{dn}{d\lambda} + \frac{d}{d\lambda} \left(n \frac{d\varphi}{d\lambda} \right) = 0, \quad (IV, 40)$$

бу ерда $n = \frac{N_i}{n_i}, \quad \varphi = \frac{1}{4} e \varphi_0, \quad d^2 = \frac{D_1}{D_2}$



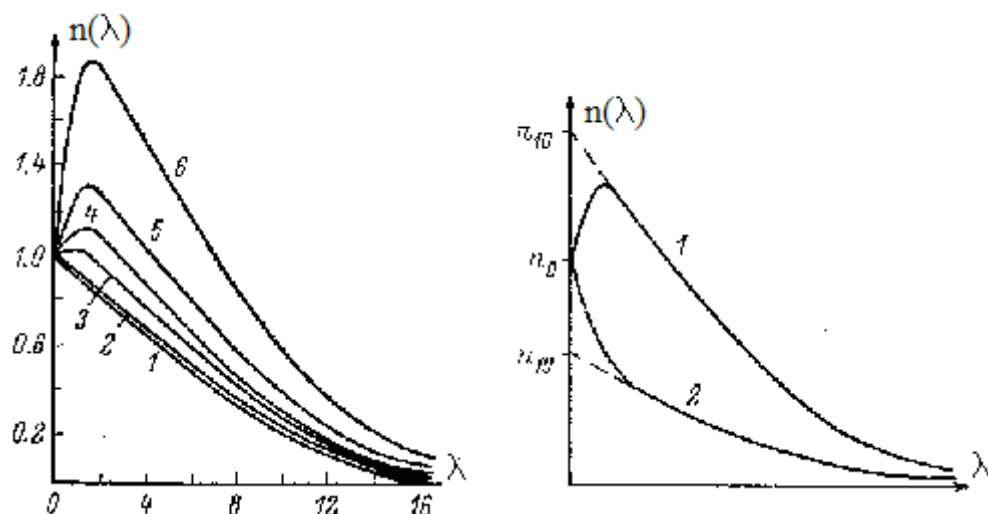
27-расм. n ва p киришмалар бир вақтдаги диффузиясида n-киришма атомлари тақсимои



28-расм. n ва p киришмалар бир вақтдаги диффузиясида донор киришма атомлари тақсимои.

Киришмалар атомлари бир марта ионланган деб олинади. 27-28 расмларда диффузияланувчи ионлар бир хил ёки турлича зарядга ва турлича чегара зичлигига эга

бўлгандаги диффузион тенгламанинг микдорий ечим натижалари келтирилган. Кутилганидек, тез диффузияланувчи киришма атомлари секин диффузияланувчи киришма атомларининг зичлиги тақсимланиши характериға кам таъсир кўрсатади. Кўпроқ тескари таъсир ахамиятға эға.



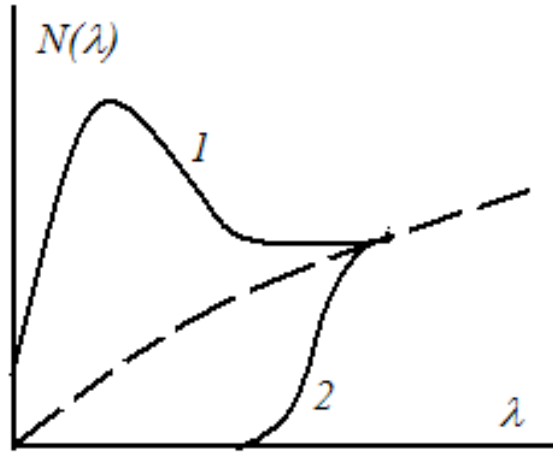
29-рasm. n ва p киришмалар бир вақтдаги 30-рasm. $n(\lambda)$ функцияси. 1- $e=+1$ (-1), диффузиясида n -киришма атомларининг 2- $e=-(+1)$ концентрацион эгри чизиқлари

Бунда тез диффузияланувчи киришма атомлари зичликларининг тақсимланиши 2 соҳаға-зичлик кескин ўзгариши соҳасига (бир хил белгили зарядларда ўсувчи ва турли белгили зарядларда пасаяувчи) ва эркин диффузияға мос келувчи соҳаға бўлинади.

30-рasmда диффузиялашувчи атомлар доимий манбадан a_0 ва b_0 (1 эгри чизиқ) бир томондан чегараланган жисмға икки хил киришма атомларининг (n ва p) бир вақтда диффузиясида n учун диффузион тенгламанинг сифатий ечими ва доимий манба a_0 дан n -киришма атомлари диффузияси учун ва p -киришманинг бир хил легирланган (p_0 -сатҳгача) яримўтказгичдан, $x=0$ чегара боғловчи бўлган (2 эгри чизиқ) холат кўрсатилган. Расмдан кўриниб турибдики, p -киришма атомлар градиентидан ҳосил бўлган майдонни ҳисобға олиш n -киришманинг концентрацион тақсимланиши ўзгаришиға олиб келади. Бунда турлича ишорали киришмалар таъсир эффекти қарама-қарши бўлади.

31-рasmда, киришма атомлар b_0 доимий манбадан p -киришма атомлари диффузияси холати учун зичлик тақсимотининг $n(\lambda)$ сифатий характеристикаси ва боғловчи чегарали яримчексиз намуна асосидан n -киришма бўғланиши келтирилган

$$n(0) = 0, \quad p(0) = b_0, \quad n(\infty) = n_0, \quad p(\infty) = 0.$$



31-расм. N -киришмалар боғланган ҳол. 1- $e=-1$, 2- $e=1$. Штрих чизик p -киришмалар йўқлигида n -киришмалар тақсимоти.

Расмдан кўриниб турибдики, чегаравий шартларда n ва p ионларининг бир хил ишорали зарядларида p -киришма атомлари электр майдони n -киришмани у ҳаракатланиётган соҳадан итариб чиқаради. Қарама-қарши белгили зарядлар ҳолида, p -киришма ҳосил қилган электр майдони шу соҳада n -киришма атомларини тўплайди. Зичликлар тақсимоти киришманинг етарлича юқори зичликларида n -киришма атомлари зичлигининг максимуми кузатилиши мумкин.

Энди, икки хил киришма атомларининг кетма-кет диффузияланиши ҳоли учун олинган диффузия тенгламаси ечимининг натижаларини кўриб чиқамиз. Бу ҳолда Больцман усулини эмас, дифференциал тенгламани қўллашга тўғри келади.

$$d^2 \frac{\partial n}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial n}{\partial x} + n \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad (\text{IV}, 41)$$

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial p}{\partial x} + ep \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad (\text{IV}, 42)$$

$$\varphi = \ln \frac{n + ep_o + \sqrt{(n + ep_o)^2 + 4}}{2}, \quad (\text{IV}, 43)$$

бу ерда $\tau = D_p t$, $d^2 = \frac{D_p}{D_n}$: $e-n$ ва p таркибий зарядлар нисбати белгиси ($e=1$ – зарядлар бир хил ишорали бўлса, $e=-1$ – турлича бўлса).

Агар, n -киришма p -киришма ортидан диффузияланса ва диффузия доимий манбадан рўй берса, масаланинг чегаравий ва бошланғич шартлари қуйидагича бўлади.

$$n(o, \tau) = n_o \quad p(o, \tau) = p_o, \quad n(x, o) = o, \quad h(x, o) = p_o f \left(\frac{x}{\sqrt{\tau_o}} \right),$$

$f\left(\frac{x}{\sqrt{\tau_0}}\right)$ - характерли сингиш чуқурлиги $x_0 \sim \sqrt{\tau_0}$, $x \geq 0$ эга бўлган киришманинг

бошланғич тақсимланиши.

Диффузиянинг турли вақтлари учун диффузия тенгламаларининг тақрибий ечимининг таҳлили бир диффузияланувчи киришманинг бошқасининг зичлиги тақсимотига бўлган таъсирини аниқлашга имкон берди.

$\tau \ll d^2 \tau_0$ бўлганда киришма атомлари ички электр майдонининг n-киришмага таъсири кристалл хусусий майдонининг таъсиридан ортиқча бўлмайди. $\tau \gg d^2 \tau_0 \frac{n_0^2}{p_0^2}$ учун n-

киришма майдони кристалл хусусий майдонида ортиқроқ бўлади. Шу билан бир вақтда, тез диффузияланувчи киришма ҳосил қилган майдоннинг секинроқ ҳаракатланувчи p-киришма диффузиясига бўлган таъсири барча вақтлар учун аҳамиятли эмас.

4.5. Яримўтказгичларда диффузиянинг вакансияли механизмида кулон ўзаро таъсирлашуви

Яримўтказгичларда диффузия кўпчилик ҳолларда заррачаларнинг кристалл панжара вакансиялари бўйлаб ҳаракатланиши орқали амалга оширилади. Яримўтказгичларда вакансиялар асосан зарядланган ҳолатларда бўлганлиги, зарядланган вакансиялар зичлиги яримўтказгичнинг кимёвий потенциали ҳолатига боғлиқлиги яримўтказгичлардаги заррачалар диффузияси коэффицентини ҳаракатчан ток ташувчиларнинг кимёвий потенциали ҳолатига (электрон ва коваклар учун) ва вакансия ҳамда диффузияланувчи зарраларнинг кулон ўзаро таъсирлашувчи олиб келади. Бу масалалар Валент ва Рамасастр томонидан, германийдаги хусусий диффузия ҳоли учун, умумийлаштирилган ҳолда—Сволин томонидан олмос панжарали яримўтказгичлардаги вакансион диффузия механизми учун кўриб чиқилган.

Вакансиялар яримўтказгичлардаги электронларнинг энергетик спектрида маҳаллий донор ёки акцептор сатҳлари ҳосил қилади. Бундай ионланган сатҳлар сони (зарядланган вакансиялар сонига тенг) кристаллнинг температураси ва электрик активлашган киришма атомлари борлигига боғлиқ бўлади. Мос равишда N_v^- , N_v^0 ва N_v -орқали—зарядланган вакансиялар, нейтрал вакансиялар ва вакансияларнинг умумий моляр улушини белгилаймиз. Зарядланган вакансия улуши N_v^- қуйидагича ёзилиши мумкин:

$$N_v^- = \frac{N_v}{1 + \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)}, \quad (\text{IV, 44}).$$

бу ерда μ - кимёвий потенциал сатҳи (Ферми энергияси), E_v – вакансиянинг акцептор сатҳи энергияси. $N_v = N_v^o + N_v^-$ бўлгани боис,

$$N_v^- = N_v^o \exp\left[\frac{(\mu - E_v)}{kT}\right]. \quad (\text{IV, 45}).$$

Қулайлик учун p_v катталиқни – киришма ионининг вакансияга қўшни ҳолатда бўлиши эҳтимолини киритамиз. Бу катталиқни

$$p_v = p_v^o + p_v^- \quad (\text{IV, 46})$$

кўринишда ёзамиз, бу ерда p_v^o –киришма ионининг нейтрал ион ёнида бўлиш эҳтимоли, p_v^- -зарядланган вакансия билан қўшни бўлиш эҳтимоли. Бошқа томондан, панжара атоми вакансия билан қўшни бўлиш эҳтимоли қуйидагича ҳам ёзилиши мумкин:

$$p_v = ZN_v, \quad (\text{IV, 47}).$$

бу ерда Z – координацион сон. Эритувчи атом яқинида вакансия ҳосил бўлиш энергиясини ΔU_v орқали белгилаймиз, киришма иони яқинида вакансия ҳосил бўлиш энергиясини $\Delta U_v'$ орқали белгиласак,

$$p_v^o = ZN_v^o \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right), \quad (\text{IV, 48})$$

бу ерда $\Delta U_s = \Delta U_v - \Delta U_v'$ (икки ҳолат оралиғидаги энтропиянинг кичик ўзгаришини эътиборга олмаган ҳолда).

Шунга ўхшаш киришма тўлиқ ионлашганда

$$p_v^o = ZN_v^- \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_c}{kT}\right), \quad (\text{IV, 49})$$

ΔU_c – зарядланган вакансия ва зарядланган ионлар орасидаги кулонли ўзаро таъсирлашув энергияси. (IV, 45) ни (IV,49) га қўйсак,

$$p_v^- = ZN_v^o \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right), \quad (\text{IV,50})$$

Нейтрал вакансиялар зичлиги фақат температура функцияси эканлиги боис,

$$N_v^o = \exp\left(-\frac{\Delta G_v}{kT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta U_v}{kT}\right) \exp \frac{\Delta S}{k}, \quad (\text{IV, 51})$$

бунда ΔG_v -вакансия ҳосил бўлишининг эркин энергияси, ΔS –фаоллашиш энтропияси. (IV, 51) ни (IV, 50) қўйсак,

$$p_v^- = Z \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_s - \Delta U_c - \Delta U_v}{kT}\right), \quad (\text{IV, 52})$$

$$p_v = p_v^- + p_v^o = Z \exp\left(\frac{\Delta S}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_s + \Delta U_v}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right] \quad (\text{IV, 53})$$

Энди киришма атомлари диффузияси коэффиценти учун ифода чиқарамиз. Диффузия коэффиценти учун умумий ифода қуйидагича берилиши мумкин:

$$D = \frac{1}{6} d^2 f, \quad (\text{IV, 54})$$

бу ерда d – атомнинг сакраш узунлиги, ν - ўтишлар частотаси,

$$f = p_v \nu \exp\left(-\frac{\Delta U_j}{kT}\right),$$

ν -атомнинг мувозанат ҳолатидан потенциал тўсиқ чўққисига ўтиши учун зарур бўлган изотермик ишига мос келувчи эркин энергиянинг ўзгариши.

Олмос тузилишли кристаллар учун $d = \frac{\sqrt{3}}{4} a$ га тенг, бу ерда a – панжара доимийси p_v учун (IV, 53) формуладан фойдаланилса, диффузия коэффиценти учун қуйидаги ифодани олиш мумкин

$$D = \frac{1}{8} a^2 \nu \exp\left(\frac{\Delta S_v + \Delta S_j}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_v + \Delta U_s + \Delta U_j}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right], \quad (\text{IV, 55})$$

ΔS_v ва ΔS_j -вакансия ҳосил бўлиш ва диффузияланувчи зарраларнинг вакансияларга ўтиш энтропиялари. (кичик энтропия хадлари S_v ва S_c бу ерда эътиборга олинмайди). (IV, 55) формула бу ерда Верт-Зинер формуласига нисбатан қўшимча хадлар $1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)$ ва $\exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right)$ бор, улар μ, E_v, U_c ва U_s билан аниқланади.

Кўрсатилган энергетик параметрлар заряд ва киришма ион ўлчамига, шунингдек Ферми сатҳининг ҳолатига ва вакансиянинг акцепторлик сатҳига боғлиқ. Бу катталикларнинг қийматлари мос келувчи формулалардан олиниши мумкин.

Киришма ион ва вакансия U_c электростатик ўзаро таъсир энергиясини қуйидаги формуладан ҳисоблаш мумкин.

$$\Delta U_c = \pm \frac{q_v q_i}{\chi d}, \quad (\text{IV, 56})$$

бу ерда q_v, q_i вакансия ва киришма ион зарядлари, χ - кристалнинг диэлектрик доимийси.

Нуксон ҳосил бўлиш энергиясининг киришма атоми ΔU_s яқинида камайиши, Фридель формуласи билан топилиши мумкин.

Тажриба маълумотлари билан таққослаш қулайлиги учун кўпинча киришма ионлар диффузия коэффиценти D_i нинг хусусий диффузия коэффиценти D_{cd} га нисбатидан фойдаланилади. Олмос туридаги кристалл панжарада хусусий диффузия коэффиценти қуйидаги формула орқали ифодаланади:

$$D_{cs} = \frac{1}{8} a^2 \nu \exp\left(\frac{\Delta S_v + \Delta S_j}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_v + \Delta U_j}{kT}\right), \quad (\text{IV, 57})$$

$$\frac{D_i}{D_{cd}} = \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]. \quad (\text{IV, 58})$$

Шундай қилиб, кристалда хусусий нуксонлар ва киришма атомлари мавжудлигига боғлиқ бўлган хусусий диффузия коэффиценти ифодасини олиш мумкин. Киришма ва хусусий нуксонлари сатҳлар хусусий яримўтказгичга нисбатан кимёвий потенциал сатҳини сурадилар. Бу омилни ҳисобга олиш хусусий диффузия коэффицентини кимёвий потенциал сатҳига боғлиқ функция сифатида ифодалаш имконини беради.

4.6. Яримўтказгичларда диффузиянинг диссоциатив механизми

Яримўтказгичларда вакансион ва тугунлараро диффузия механизмидан ташқари вакансия ва тугунлар оралиғи бўйлаб киришманинг бир вақтдаги диффузияси кузатилади. Бунда вакансиялар ва тугунлар оралиғи бўйлаб, киришма атомлари турли зарядли ҳолатларда ҳаракатланиши мумкин, бу бир неча ўзаро боғланган диффузион оқимлар вужудга келишига олиб келади, улар орасида атомларнинг тинимсиз алмашинуви амалга оширилади. Диффузиянинг бундай механизми диссоциатив диффузия деб аталади. У мис гуруҳидаги элементлари ва $A^{III} B^V$ бирикмалар элементлари диффузияси учун хос миснинг германийда диссоциатив диффузия механизми Фрэнк ва Тернбол ва Стредж томонидан таҳлил қилинган, $A^{III} B^V$ бирикмалардаги диссоциатив диффузия кўриб чиқилган.

Аввало, заряд ҳолатини эътиборга олмай, киришманинг бир вақтда вакансия ва тугунлар оралиғи бўйлаб диффузиясини кўриб чикамиз. Диффузияланувчи зарранинг

тугундан тугунлар оралиғига ва аксинча ўтиши қуйидаги реакция кўринишида ёзилиши мумкин.



A^s - бу ерда тугундаги атом, A^i -тугунлар оралиғидаги атом, V - вакансия.

Агар, мос равишда атом ва вакансиялар зичлик миқдорини N_s , N_i ва N_v билан белгиласак, вақт ўтиши билан атомларнинг вакансиядаги концентрацияси бимолекуляр реакциясининг ўзгариши

$$\tau \frac{\partial N_s}{\partial t} = KN_i N_v - N_s \quad (IV,60)$$

тенглама орқали ёзилиши мумкин :

$$K = \frac{N'_s}{N'_i N'_v}$$

бу ерда штрих билан зичликларнинг мувозанатий қийматлари белгиланган (эрувчанлик) τ - вақт константаси. Худди шундай тенглама тугунлар оралиғидаги атомлар зичлиги ўзгариши учун ҳам тузилиши мумкин. Бунда, зичликларнинг мувозанатий қиймати, τ - вақт константаси фақат температура функцияси деб, ҳисобланганда аралашма атомларнинг вакансиялар бўйлаб диффузия коэффиценти (D_v) тугунлараро диффузия коэффиценти (D_i) анча кичик, вакансиялар бўйлаб киришма оқими эътиборга олинади ва бир хил ҳолларда диффузияланувчи атомлар ва вакансиялар учун диффузия тенгламалари қуйидаги кўринишда ёзилади:

$$\frac{\partial}{\partial t}(N_i + N_s) = D_i \frac{\partial^2 N_i}{\partial x^2}, \quad (IV,61)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(N_v + N_s) = D_v \frac{\partial^2 N_v}{\partial x^2} + K_v(N'_v - N_v), \quad (IV,62)$$

D_v -вакансиялар диффузия коэффиценти, K_v -мономолекуляр реакцияларда кристаллардаги вакансияларнинг генерация тезлигини билдирувчи константа. (IV,60)-(IV,62) тенгламалар умумий ҳолда мураккаб кўринишга эга, шунинг учун бир неча хусусий ҳоллар қўрилган, бунда бирламчи реакциялардаги маҳаллий мувозанат жуда тез бўлади деб фараз қилинган ($\tau = 0$). 2- вариант ўринли бўлиши мумкин: 1) K_v константа жуда катта, шунинг учун вакансиялар зичлиги N_v мувозанатдаги N'_v дан катта фарқ қилмайди ва чекловчи жараён бўлиб киришманинг тугунлар оралиғидаги диффузия жараёни хизмат қилади. 2) K_v жуда кичик, масалан вакансиянинг асосий манбаи бўлиб сирт хизмат қилади, $\tau = 0$ бўлган (IV,61) ва (IV,62) тенгламалар Фикнинг оддий тенгламалари кўринишини олади, аммо уларга

$$D_1 = \frac{N_i' D_i}{N_i' + N_s'}, \quad (\text{IV},61)$$

ва

$$D_2 = \frac{N_v' D_v}{N_v' + N_s'} \quad (\text{IV},62)$$

эффектив диффузия коэффициентлари киради.

Бу ерда кўрилган K_v нинг оралиқ қийматлари ҳоли анча мураккаб ҳисобланади.

Бу ерда баён қилинган диффузиянинг диссоциатив механизми баёнида киришма зарраларининг турли заряд ҳолатларида вакансия, ҳамда тугунлар оралиғида жойлашиш эҳтимоли эътиборга олинмаган. Бу ҳол эътиборга олинса, масалан ечим турли заряд ҳолатлардаги зарралар учун турлича диффузия коэффициентли қўшимча диффузия оқимлари пайдо бўлиши ҳисобига ва шунингдек ҳар бир зарядли зарралари ҳолатда зарраларнинг зичлиги ярим ўтказгичдаги Ферми сатҳининг ҳолатига боғлиқ бўлгани учун мураккаблашади.

Ферми сатҳи ўз навбатида киришма атомлари зичлигига боғлиқ, киришма зичлиги эса диффузия натижасида кристалл бўйлаб нотекис тақсимланган, бу эса диффузия коэффициентининг яримўтказгичнинг кимёвий потенциал сатҳи ва диффузияланувчи киришма зичлигининг ўзаро мураккаб боғланишига олиб келади. Табиийки, бу ҳолда зичлик тақсимоти ҳам мураккаб характерга эга бўлади. Бу ҳол изоконцентрацион диффузия усулини қўлланилганда бартараф этилиши мумкин. Бунда кристалл олдиндан диффузияланувчи киришма билан тўйингунча легирланади, кейин эса диффузион тақсимланиш нишонли атомлар ёрдамида текширилади. Бунда зичлик тақсимоти доимий диффузия коэффициентли Фик тенгламасининг ечими орқали ифода этилади.

Турли зарядли зарралар ҳолларида диффузиянинг диссоциатив механизмида юзага келувчи диффузия коэффициентининг зичликка боғлиқлигини мисол қилиб, рухнинг галлий ва индий арсенидлардаги диффузиясини кўриб чиқамиз

Чэнг ва Пирсон томонидан бажарилган, Zn нинг $GaAs$ даги диффузия коэффициентининг зичликка боғлиқлигини ҳисоблашда қуйидаги мезонлар асос қилиб олинган.

1) Галлий панжараси ости вакансияларида рух нейтрал атом ёки бошқа киришмалар билан ионли мувозанатда турувчи бир марта зарядланган манфий ионлар кўринишида жойлашади.

2) Атомларнинг камроқ қисми тугунлар оралиғида икки марта зарядланган мусбат ионлар кўринишида бўлади;

3) Галлий панжарасидаги вакансиялар нейтрал ва ҳамма вақт уларнинг миқдорий зичлиги таъминланади;

4) Рух диффузияси тугунлар оралиғида ҳам, вакансиялар бўйлаб ҳам амалга ошади; Рухнинг зичлиги юқори бўлганда тугунлар оралиғидаги диффузия устун туради.

Вакансия ва тугунлар оралиғидаги бир вақтдаги диффузия усулида диффузия тенгламаси қуйидагича ёзилади.

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial N_i}{\partial x} + D_s \frac{\partial N_s}{\partial x} \right), \quad (\text{IV}, 65)$$

бу ерда N - рухнинг умумий зичлиги. $N = N_i + N_s \approx N_s$, $N_i \approx N_i^{2+}$

$$D_{\text{эфф}} = D_i \frac{\partial N_i}{\partial N} + D_s \frac{\partial N_s}{\partial N} \quad (\text{IV}, 66)$$

диффузиянинг эффектив коэффициентини киритиб ва диффузиянинг тугунлараро таркибловчисининг устунлигини $D \frac{\partial N_i}{\partial N} \gg D_s \frac{\partial N_s}{\partial N}$ эътиборга олсак,

$$D_{\text{эфф}} = D_i \frac{\partial N_i}{\partial N}. \quad (\text{IV}, 67)$$

Рухнинг тугунлари оралиғидан вакансияларга ва аксинча ўтишини қуйидаги реакция кўринишида ёзиш мумкин:



Бу реакцияга таъсир қилувчи массалар қонунини қўллаб,

$$N_i = (k_1 / N_v^o) (\gamma p)^3 N^-. \quad (\text{IV}, 69)$$

ифодани оламиз.

Бу ерда k_1 -мувозанат константасининг тескари қиймати, N_v^o -галлий панжарасидаги вакансиялар зичлиги, p -коваклар зичлиги, γ -электрон гази пайдо бўлиш сатҳини ҳисобга олиш учун киритилган фаоллик коэффициенти. Киришма соҳасида $N \gg n_i$ ва нейтраллик шarti бўлиб $N^- = p$ тенглик бўлади. Агар бу шартни (IV,69) га қўйиб, γ нинг p га (ёки N^- ва N^- рухнинг тўлиқ зичлигига) боғлиқлигини эътиборга олиб, диффузия коэффициентининг зичликка боғлиқлигини аниқловчи $\frac{\partial N_i}{\partial N}$ нисбат учун қуйидаги ифодани олиш мумкин ([28] га қаранг)

$$\frac{\partial N_i}{\partial N} = \frac{k_1}{N_v^o} \left[4\gamma^3 (N^-)^3 \frac{\partial N^-}{\partial N} + 3\gamma^2 (N^-)^4 \frac{\partial \gamma}{\partial N} \right]. \quad (\text{IV}, 70)$$

(IV, 70) ни (IV, 67) га қўйсак,

$$D_{\phi\phi} = K \left[\frac{\gamma^3 (N^-)^4}{4} [F [4 + 3G]] \right], \quad (\text{IV}, 71)$$

бу ерда $K = k_1 D_i / N_v^o$, $F = \frac{\partial \ln N^-}{\partial \ln N}$ ва $G = \frac{\partial \ln \gamma}{\partial \ln N^-}$.

Бошқа томондан, ионлашган акцепторлар (манфий зарядланган рух ионлари) зичлиги N^- умумий N зичлиги билан қуйидаги тенглама орқали боғланган

$$N^- = \frac{N}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right)}. \quad (\text{IV}, 72)$$

(IV, 69) га кирувчи γ р қуйидаги формула

$$\gamma = 2 / h^3 (2\pi m^* kT)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - \mu}{kT}\right). \quad (\text{IV}, 73)$$

орқали ифодаланади. Формулага хар бир N концентрация учун N^- , F , ларни қўйиб, (F - N^- нинг N га боғлиқлик графигидан топилади), γ ва G (γ ва G алоҳида баҳоланган)нинг тажриба маълумотлари билан мос келувчи Zn нинг $GaAs$ га диффузияланиши коэффицентининг концентрацион боғлиқлиги олинган.

Zn нинг $ZnAs$ га диффузияланиши коэффицентининг концентрацияга боғлиқлигини хисоблашда, асосан рухнинг индий арсенидидаги зарядли ҳолати ҳақидаги тажриба маълумотлари асосида бажарилган, диффузия 2 та ўзаро боғлиқ оқим манфий зарядланган Zn_g^- ионлари қўринишида ва тугунлар оралиғида икки марта зарядланган мусбат ионлар Zn_i^{2+} қўринишида юз беради ҳамда вакансия ва тугунлар оралиғида рух билан тугунлараро атомлар алмашинуви нейтрал ҳолатлар орқали юз беради деб хисобланган.



Бу реакциянинг мувозанат доимийси таъсирлашувчи массалар қонуни асосида берилган температурада қуйидаги шартдан олинади

$$K = \frac{1}{N_v^o} \cdot \frac{N_g^o}{N_i^o}. \quad (\text{IV}, 75)$$

Вакансиялар ва тугунлар оралиғидаги турли зарядли ҳолатлардаги рух атомлари зичликлари орасидаги боғланиш қуйидагича аниқланади:

$$N_i^o = N_1 F_1, \quad (\text{IV}, 76)$$

$$N_i^+ = N_1 (1 - F_1), \quad (\text{IV}, 77)$$

$$N_i^{2+} = N_i^+ (1 - F_1^*), \quad (\text{IV}, 78)$$

$$N_g^o = N_g(1 - F_2), \quad (\text{IV, 79})$$

Бу ерда F_1 , F_2^* ва F_2 - Ферми таксимот функцияси:

$$F_1 = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(E_d - \mu)} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(-\mu)}, \quad (\text{IV, 80})$$

$$F_1^* = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(-E_i - \mu)}, \quad (\text{IV, 81})$$

$$F_1 = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp(E_a - \mu)}, \quad (\text{IV, 82})$$

Бу ерда E_i ва μ - мос равишда тақиқланган соҳа кенглиги ва Ферми сатҳи: E_d ва E_a - рухнинг биринчи донор сатҳи тугунлар оралиғида ва вакансиядаги рухнинг акцептор сатҳи. $N = N_i + N_s \approx N_s$ бўлгани учун, (IV, 82) га N_s^o ва N_i^o ни қуйиб, N_s ва N_i^{2+} орқали, (IV, 76-IV, 82) асосида,

$$\frac{N_i^{2+}}{N} = \frac{1}{kN\nu} \frac{\frac{1}{2} \exp(-\mu) \frac{1}{2} \exp(-E_i - \mu)}{\left[1 + \frac{1}{2} \exp(E_i + \mu) \right]} = K_2 f(\mu), \quad (\text{IV, 83})$$

ифодани оламиз

Бу ерда K_2 -константа. Бошқа томондан, вакансиялардаги рухнинг диффузия коэффициенти тугунлар оралиғидаги рухнинг диффузия коэффициентидан бир неча марта кичиклиги боис $D_s \ll D_i$, худди рухнинг галлий арсениди ҳолидек, эффектив диффузия коэффициенти $D_{\text{эфф}}$ рухнинг тугунлар оралиғидаги атомлари улуши билан аниқланади

$\left(\frac{\partial N_i}{\partial N} \right)$:

$$D_{\text{эфф}} = D_i \frac{\partial N_i}{\partial N}. \quad (\text{IV, 84})$$

InAs да рух тугунлар оралиғида икки марта ионлашган мусбат ионлар кўринишида диффузиялангани учун

$$D_{\text{эфф}} = D_i \frac{\partial N_i^{2+}}{\partial N}. \quad (\text{IV, 85})$$

(IV, 83) асосида

$$\frac{\partial N_i^{2+}}{\partial N} = K_2 \left(f(\mu) + \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial \ln N} \right). \quad (\text{IV, 86})$$

$f(\mu)$ ва $\frac{\partial f}{\partial \mu}$ нинг қиймати (IV,83) дан аниқланади, Ферми сатҳининг рух атомлари

зичлигига боғлиқ ҳолда ўзгариши нейтраллик тенгламасидан топилади.

$$N_s^- + n = p + N_i^+ + N_i^{2+}. \quad (\text{IV}, 87)$$

$D_{эфф}$ нинг ва ZnAs даги рухнинг N зичлигига боғлиқлигини берилган формулалар асосида бажарилган ҳисоблаш натижалари кўрсатишича, $D_{эфф} \sim N^{1.9}$ тажрибалардан олинган боғлиқлик $N^{1.85}$ га мос келади. N_{zn} қийматнинг $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ дан кам соҳасида бундай боғлиқлик кузатилмайди.

Шундай қилиб, эффектив диффузия коэффициентининг атомлар зичлигига боғлиқлиги ушбу ҳолда диффузия коэффициентининг яримўтказгичдаги Ферми сатҳининг ҳолатига боғлиқлиги билан белгиланади.

Бу ерда Zn нинг GaAs даги диффузия коэффициентининг Ферми сатҳига боғлиқлиги ички электр майдонини ҳисобга олган ҳолда ҳисоблаб чиқилган.

Назорат саволлари

1. Кристалларда киришма атомлари бирикмалари ҳосил бўлишининг сабаблари ва оқибатлари?
2. Киришмавий яримўтказгичларда ички электр майдони вужудга келиши сабаблари?
3. Эффектив диффузия коэффициенти нималарга боғлиқ?
4. Доимий манбадан бир томони чегараланган жисмга диффузияни қандай тушуниш мумкин?
5. Вакансиялар орқали диффузия механизмлари?
6. Диффузиянинг диссоциатив механизмини тушунтиринг?
7. Диффузия жараёнларида нейтраллик шарти?

5-БОБ. КРЕМНИЙДА АТОМЛАР ДИФФУЗИЯСИ

Хозирги вақтда кремний яримўтказгичли асбоблар, курилмалар, микросхемалар тайёрлаш учун кенг қўлланиладиган хом ашёдир. Диффузия р-п ўтиш олишнинг асосий технологик услуби бўлгани учун, кремнийда диффузияни кузатишга кўплаб тадқиқотлар бағишланганлиги тушунарлидир. Улардан купчилиги, айниқса, сўнгги йилларда нашр қилинганлари, яримўтказгичли асбоблар тайёрлашнинг диффузия технологияси билан боғлиқ масалалардир. Ушбу бобда кремнийда киришмаларнинг диффузиясига хос бўлган умумий қонуниятларни кўриб чиқамиз.

5.1 Кремнийда донор ва акцептор киришмалар диффузияси

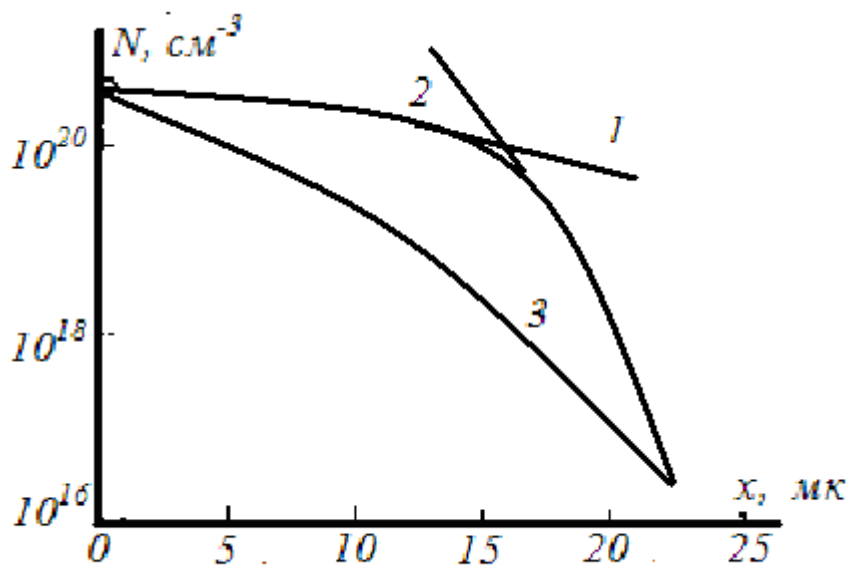
Даврий системанинг III ва V группа элементлари диффузияси бўйича биринчи тадқиқотлар 1954 йил бошланган. Бор ва фосфорнинг диффузия коэффициентларини аниқлаш учун қатламни бирин-кетин камайтириб электр ўтказувчанликни ўлчашга асосланган услуб қўлланилган.

Даврий системанинг III ва V гуруҳларининг бошқа элементлари Si га диффузияланиши бошланғич солиштирма қаршилиқ ρ_1 ва ρ_2 га эга бўлган икки намунада р-п ўтишнинг ётиш чуқурлигини таққослаш усули ёрдамида текширилган. р-п

Ўтишнинг ётиш чуқурлигини аниқлаш учун намуналар юқори ҳароратда диффузион қиздирилиб олинган намуна бир томони кичик бурчак остида ($\sim 5^\circ$) силлиқланган, кейин шу қия текислик юзаси таркибида бироз HNO_3 бўлган концентрлашган HF кислота билан ҳўлланади. Бунда р-соҳа тўқ тусга киради, n-соҳа эса очранглигича қолади. р-п ўтиш чуқурлиги микроскоп ёрдамида аниқланади.

Диффузияланувчи киришма атомларининг чегарадаги концентрацияси намунанинг легирлаш даражасигага боғлиқ бўлмаган ҳолида ва турли солиштирма қаршиликка эга намуналарда р-п ўтишнинг ётиш чуқурлигини диффузион қиздириш жараёнида легирланувчи киришманинг қайта тақсимланишини эътиборга олмаслик диффузия коэффициентини бир қийматли аниқлаш имконини беради.

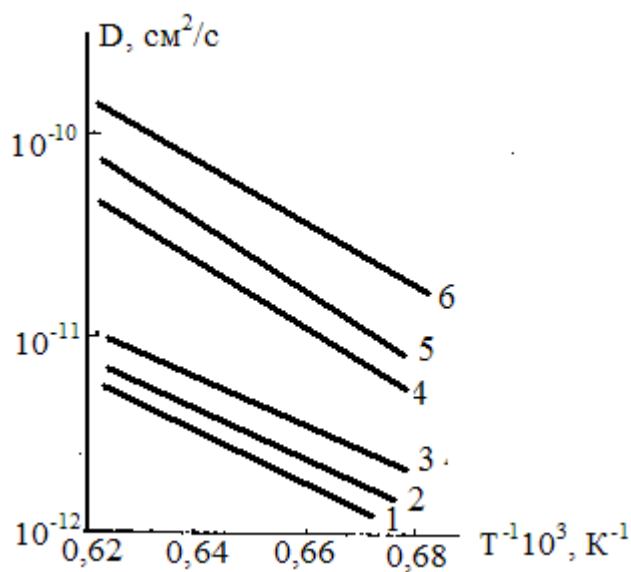
Фосфор атомлари кенг қўлланиладиган донор характерли киришма бўлиб ҳисобланади. Фуллер ва Дитценбергер ўлчашлари фосфорни Si-да erfc -боғлиқликка мос келувчи концентрацион тақсимотини олиш имконини берди. Олинган маълумотлар бўйича фосфорнинг Si-даги диффузия коэффициентининг температурага боғлиқлиги ҳам аниқланди. Аммо, Субанев ва Макинтош тадқиқотлари кремнийда фосфорнинг зичлиги тақсимоти ноанъанавий кўринишга эга эканлигини кўрсатди. (32-расм). Фосфорнинг эффектив диффузия коэффициенти сиртий зичликка ва намунанинг легирланганлик даражасига боғлиқ (33-расм). Бунда диффузияни фаоллаштириш энергияси ва экспонента олдидаги кўпайтма тажрибада аниқланган шундай катталиклардан кескин фарқ қилади.



32-расм. Кремнийда фосфор диффузияси; 1-юза яқинида, 2-хажмда, 3- erfc функция.

Маргумушнинг кремнийдаги диффузияси биринчи бор Фуллер ва Дитценберг томонидан текширилган, улар диффузион киздиришларни кавшарланган кварц ампулаларда ўтказган.

Армстронг маргумуш диффузиясини газ-ташувчи (кислородли азотда) оқимда бўғли фазада, Фуллер ва Дитценберглар олган температура оралиғида, р-п ўтиш усулини қўллаган ҳолда ўрганган. Армстронг топган диффузия параметрлари олдин олинган натижалардан юқори бўлиб чиқди, бу иккала ишдаги фарқ чегара зичликларининг фарқи бор эканлиги билан тушунтирилди.



33-расм. Турли юза концентрациясида кремнийда фосфор атомлари эффектив диффузия коэффициентининг температурага боғлиқлиги

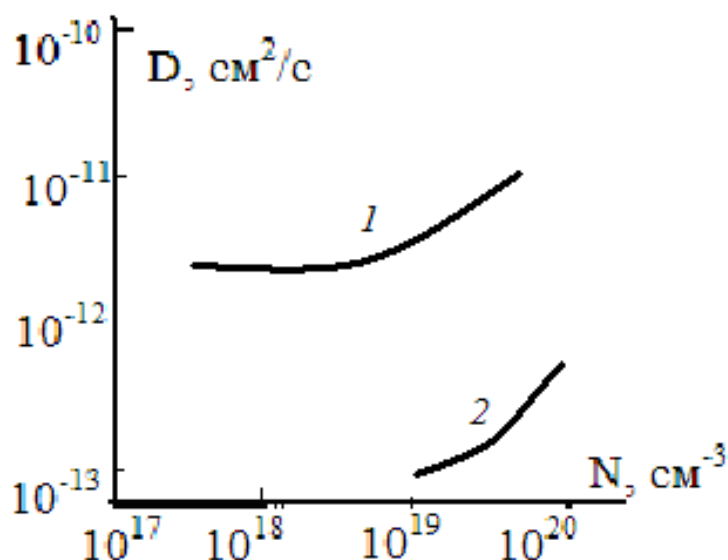
Мастерс ва Фейрфилд изоконцентрацион диффузия ва нейтронлар ёрдамида фаоллаштириш техникасини қўллаб, маргумушнинг диффузия коэффициенти электронлар зичлиги ортиши билан ортиб боришини кўрсатиб бердилар. Ўзига яқин материал учун улар $850 \div 1150^\circ \text{C}$ оралиғида Армстронг маълумотлари билан деярли мос келадиган диффузион параметрлар олишган.(9-жадвалга қаранг).

Sb^{124} изотоп ёрдамида Поган ҳамкасблари билан сурманинг Si-да диффузиясини батафсил текширдилар ва Фуллернинг р-п ўтиш усулида олинган натижалари билан деярли тўғри келувчи натижаларни олдилар.

Акцептор киришмали III группа элементларидан бор (В)-нинг диффузияси қўплаб маротаба тадқиқот этилган. Бор (В) атомлари диффузия параметрлари Si-да бир неча марта ўлчанган ва уларнинг қийматлари бир-биридан катта фарқ қилмайди. Кузатилган

фарқ В диффузия коэффициентининг Si-даги дастлабки легирловчи киришма атомлари зичлигига боғлиқлиги сабаблидир. Фосфор мисолида бу боғлиқлик бевосита тажрибалар легирланувчи фосфор зичлиги ортганда, диффузия коэффициентининг ортиши кўрсатиб берилган.

Фосфор билан бўлган ҳолатдагидек, катта чегаравий зичликларда борнинг (В) концентрацион тақсимланиши erfc -функция билан ифода қилинмаган. Бунинг сабаби диффузия коэффициентининг P концентрациясига боғлиқлигидир (34-расм).



34-расм. Диффузия коэффициентининг P концентрациясига боғлиқлиги

Алюминийнинг кремнийдаги диффузияси Миллер ва Севедж томонидан текширилган. Диффузион қиздириш учун кремний ва алюминий намуналари солиштирма қаршилиги 20 Ом·см бўлган контейнерга жойланган.

Ўз навбатида бу контейнер тантал трубкага, у эса кварц трубкага жойлаштирилган. Бу эҳтиёт чоралари текшириляётган намуналарни кварц билан реакцияга киришмаслиги мақсадида қилинган. Кварц трубка орқали тозаланган аргон ёки гелий 2,5 л/мин тезлик билан ўтказилиб турилган. Юқори температурларда тантал худди аргон ва гелий каби бир қатор киришмалар учун геттер тутиб олувчи каби таъсир қилганлиги, қуйдиришдан кейин сирти силлиқланган кремнийли намуналар дастлабки яркироклигини тўлиқ сақлаб қолиши аниқланган. Текширишлар маргумуш билан легирланган электрон турдаги кремний кристалларида бажарилган.

Диффузия коэффициентини аниқлаш учун бу ерда сиғимли услуб қўлланилган. Электрон-ковакли ўтиш сиғимининг тескари силжиш кучланиш катталигига боғлиқлигини ўлчаб, электрон-ковак ўтишда диффузияланувчи киришма атомлари зичлигининг градиентини ҳисоблаш мумкин. Зичлиги бутун бир сиғим бўйича деярли

доимийлиги учун (маргумушнинг диффузия тезлиги алюминий диффузия тезлигидан анча кам), сиғимли услуб билан аниқланаётган зичлик градиентини тўлиқ ҳолда алюминий диффузиясига ҳисобига дейиш мумкин. Бунда a зичлик градиенти диффузия коэффициентини D га боғлиқ

$$a = \left(\frac{\partial N}{\partial x} \right)_{x=x_0} = N_0 (\pi Dt)^{-1/2} \exp(-\eta_0^2), \quad (V,1)$$

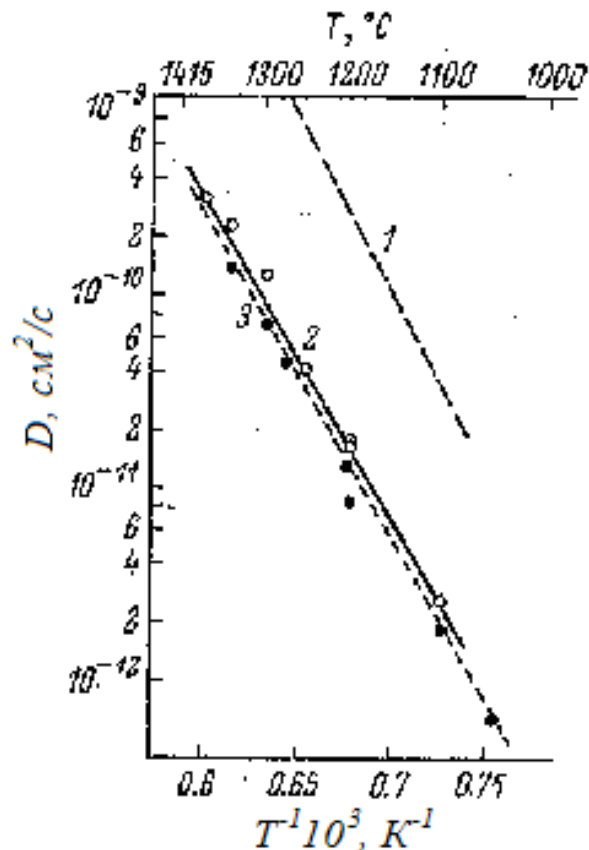
бу ерда

$$\eta_0 \equiv x_0 (4Dt)^{-1/2}, \quad (V,2)$$

(V,1) ва (V,2)ларни таккоссак,

$$\eta^1 (\exp \eta_0^2) \operatorname{erfc} \eta_0 = \frac{x_0^2 l}{96 \pi^{5/2}} \cdot \frac{N_d x A^3}{x_0} \equiv \beta, \quad (V,3)$$

Бу ерда, N_d -донор атомлар зичлиги. N_d , x , A ва x_0 тажрибада ўлчанганлиги учун, юқорида келтирилган тенгликлардан β, η_0, D ва N_0 ни аниқлаш мумкин. Алюминийнинг кремнийдаги диффузия коэффициентининг турли температуралардаги қиймати 35-расмда берилган, ўша ерда таққослаш учун бошқа тадқиқотларнинг маълумотлари ҳам келтирилган.

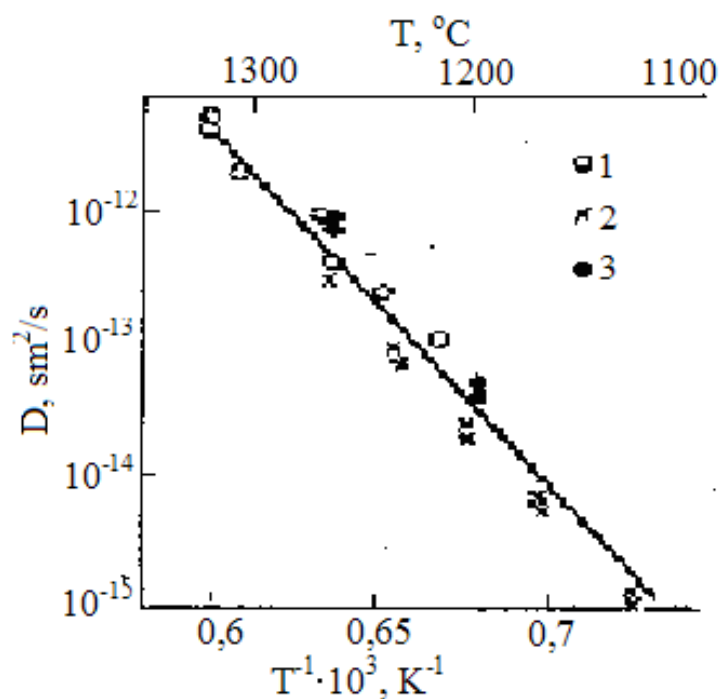


35-расм.(1)[60],(2)[3],(3)[59] ишларга асосан кремнийда Al диффузия коэффициентининг температурага боғлиқлиги.

5.2. IV группа элементларининг кремнийдаги диффузияси

Кремнийдаги ўздиффузия нисбатан яқин вақтларда ўрганилган, бунда кўп муаллифларнинг тадқиқот натижалари, германийдаги ўз диффузия жараёнларидан кўра кўпроқ фарқ қилади, бунда қисқа яшовчи изотоплар билан ишлаш вақтидаги тажриба қийинчиликларга боғлиқ (ишлатилаётган Si^{31} изотопининг ярим парчаланиш даври 2.6 соатга тенг). Мастерс ва Фэйрфильд Si^{31} манбаси сифатида иссиқлик нейтронлар оқими билан бевосита 2 соат ичида нурланган ўта тоза кремний пластинкасидан фойдаланишган. Диффузия тоза ва легирланган кремнийнинг кимёвий усул билан силлиқланган пластинасида ўтказилган. Бунда, дислокациялар зичлиги 10^3 см^{-2} дан кам бўлиб ва намуналар ёпиқ ампулаларда жойлашган. Намуналар сиртига Si^{31} ни ташиб ўтиш учун ампулаларга водород хлориднинг бирмунча миқдори киритилган. Уларни иссиқлик ёрдамида ишлов беришдан аввал ва кейинги ўлчашларнинг кўрсатишича, буғланиш ва эпитаксия бўлмаган қатламлар анодли суюлтиришда олинган, бунда концентрацион чизиқ характери аниқлаш учун эритманинг радиоактивлиги ўлчанган. Гхоштагор кремнийнинг ўз диффузияси параметрларини ўлчаш учун стабил изотоп Si^{31} ни қўллаган. Қайта термо ишловдан кейин намуна иссиқлик нейтронлари билан нурланган ва цинтиляцияон спектрометр ёрдамида берилган γ -радиоактивликнинг намунадаги қиймати қаватма-қават таҳлил асосида ўтказилган. Кремнийнинг ўз диффузияси коэффицентининг температурага боғлиқлиги 36-расмда кўрсатилган.

Ge ва Si нинг ковалентли кристалларида ўздиффузия металл атомларига нисбатан пастроқ тезликда ўтади ва фаолланиш энергияси каттароқ бўлади. Бу ҳолат кремний ва германийдаги ўз атомлари диффузияси жараёнлари асосан вакансиялар бўйлаб миграция йўли билан амалга ошишини кўрсатади. Бироқ, бундай вакансион механизм тажриба маълумотларини ҳаммасини ҳам, масалан, экспоненциал олди кўпайтманинг нисбатан катта қийматини ва легирлашнинг ўз диффузияга таъсир кўрсатиш характери тушунтириб бера олмайди.



36-расм. Пирта [17] (1), Мастерс ва Фэйрфильд [15,16](2), ва Гхоштагор[14] (3) ларга асосан кремнийда ўз диффузия коэффициентининг температурага боғлиқлиги.

Фэйрфилд ва Мастерс тажрибаларида ўз диффузия коэффициенти легирланган n- ва p-турдаги кремнийда тоза кремнийга нисбатан каттароқ эканини кўрсатади. Аммо бу тажриба натижалар ягона нуқтаий назардан изохланмайди. Шунинг учун муаллифлар 2 хил механизм таклиф қилдилар: n-турдаги кремнийда ўз диффузия жараёнининг тезлашиши кристалдаги вакансиялар акцептор характерда бўлади, шунинг учун уларнинг зичлиги электрон материалда юқоридир. p-турдаги кремнийда (бор билан легирланган) эффектив ўз диффузия коэффициенти кристалл панжарадаги катта механик кучланиш хисобига ортади.

Зеегер ва Чик кремнийда тугунлараро ўз диффузия механизми ҳақида тахминларни илгари сурдилар. Эритилган кремний монокристаллига нисбатан 9,6 % га юқори зичликка эгаллигига асосланиб, улар бузилган кремнийда чўзилган вакансия ва тугунлар оралиғи деб номланувчи, юзага келувчи нуқсон борлигини кўпайтма кўрайтма уларнинг ҳосил бўлиш энтропияси юқори бўлиб, экспоненциал олди кўпайтманинг юқори қийматга олиб келиши ҳақидаги тахминлар билан чиқдилар. «Чўзилган» тугунлар оралиғи ҳам донорлик, ҳам акцептор хоссаларига эга бўлиши керак, яъни ўзига яқин бўлган соҳада уларнинг зичлиги минимал бўлади.

Углероднинг кремнийдаги диффузияси тезлиги Ньюмен ва Уэйкфилд томонидан 1070÷1400°C да углероднинг диффузия коэффициенти ўрганилган ва III гуруҳ

элементлари ичида энг катта қийматга эга ($3 \cdot 10^{-12}$ дан $6,3 \cdot 10^{-10}$ см²/сек гача) бўлиши кўрсатилган.

Германийнинг кремнийдаги диффузия коэффициентини Д.А.Петров ходимлари билан аниқлаган. Улар, солиштирма қаршилиги 1 дан 10 ом·см га тенг бўлган p-турдаги кремний намунаси сиртига вакуумда чанглатиш ёрдамида ўтказиладиган Ge^{71} радиактив изотопидан фойдаланганлар.

Диффузион қиздириш аргон билан тўлдирилган кварц ампулаларда ўтказилди. Киришма атомлар зичлиги тақсмоти ҳам силлиқланган катламлар нисбий активлигини ўлчаш, ҳам намунанинг қолдиқ активлигини ўлчаш орқали аниқланди. Натижалар бу икки ҳолда ҳеч қандай аномалия бўлмаслигини кўрсатди. Айтиб ўтиш жоизки, аниқланган германий атомлари диффузиясини фаоллаштириш энергияси, ўз диффузия фаоллаштириш энергиясидан бир мунча юқори. Агар кремний атомлари германий атомлари билан кимёвий бирикмалар ҳосил қилмаслигини эътиборга олинса бу ҳолат мунозаралидир.

Қалайнинг диффузия параметрлари кремнийда қалай билан фосфор ёки борнинг бир вақтдаги диффузиясиасосида ўрганилган. Диффузион қиздириш $1050 \div 1200^\circ\text{C}$ оралиғида ўтказилган. Киришма манбаси сифатида мос ҳолда, концентрацияси $4 \cdot 10^{19}$, $1,7 \cdot 10^{21}$, $1,7 \cdot 10^{20}$ см⁻³ бўлган қалай, фосфор ёки бор билан лигерланган кремний кукунидан фойдаланилган. Қалайнинг зичлик тақсмотини олиш учун намуналар нейтронлар ёрдамида активлашишга дучор қилинган, кейин уч кунлик тиндиришдан сўнг нисбий радиоактивликни намунани қаватма- қават ўлчаш усулида ўрганилган.

Ўз диффузияни ўрганишда қалайнинг диффузия коэффициенти фосфор билан легирланган намуналарда ортишини ва бор (В) билан легирлашганда электрон турдаги кремнийда вакансияларнинг зичлигига боғлиқ бўлмаслиги аниқланди.

5.3. Кремнийда литий ионларининг ҳаракатчанлиги ва диффузияси

Кремнийдаги литий атомларининг диффузияси унинг германийдаги диффузияси ҳолига ўхшаш тарзда юз беради. Литий суқилма Si-Li каттик эритмасини ҳосил қилиб, Si да аномаль (хос бўлмаган) юқори тезликда диффузияланадиган донор киритма сифатида намоён бўлади. Биринчи марта литийнинг кремнийдаги диффузияси Фуллер ва Дитценберг томонидан p-n ўтиш усули билан ўрганилган. Германий билан солиштирганда литийнинг кремнийдаги диффузия тезлиги кичик температура соҳасида ($400 \div 500^\circ\text{C}$) деярли бир тартибга паст (10^{-6} ва 10^{-7} см² / сек Ge ва Si учун). Бироқ, температура

кўтарилиши билан бу фарқ камаяди ва 900°C да литийнинг германий ва кремнийдаги диффузия тезликлари бир тартибда бўлади ($\sim 10^{-5}$ см²/сек).

2-жадвал

T, °C	T, сек	E, в/см	$u \cdot 10^6$, см ² / В·сек	$D \cdot 10^7$, см ² / сек
360	4500	12.0	0.258	0.147
390	4200	13.0	0.452	0.258
422	3600	11.3	0.675	0.405
460	4200	8.15	1.11	0.70
494	3600	7.55	1.64	1.08
527	3000	5.95	2.61	1.80
564	2040	6.23	4.36	3.15
620	1500	5.20	6.60	5.10
670	1200	4.21	11.0	8.95
707	660	4.75	14.0	11.8
780	360	3.68	23.0	20.9
877	300	3.40	36.0	27.3

Фуллер ва Северинс литий ионларининг кремнийдаги ҳаракатчанлигини юқорида баён этилган усуллар ёрдамида батафсил ўрганишган. 360÷860°C оралиғида кремнийда литий бир марта зарядланган мусбат ионлар сифатида ҳаракатланиши кўрсатилган. 2-жадвалда олинган Li атомлари ҳаракатчанлиги u қиймати ва литийнинг кремнийдаги диффузия коэффиценти D турли температура T ва қиздириш вақтлари t да кўрсатилган. Ҳаракатчанликнинг қийматлари бевосита Холл коэффицентини ўлчаш ёрдамида, унга мос келувчи D эса Эйнштейн нисбати $\frac{U}{q} = \frac{D}{E}$ дан топилган.

5.4 Ишқорий элементлар диффузияси

Э. Пелл литийнинг мусбат ионлар кўринишида ҳаракатланиш хоссасидан фойдаланиб, унинг кремнийдаги кислород билан ўзаро таъсирини ўрганиш учун кичик температура соҳаларида диффузия коэффицентининг температурага боғлиқлигини аниқлаган. Пелл томонидан ишлаб чиқилган ва асосланган ионли дрейф усулидан p-n ўтишда майдон сифимий заряд ионларини олиб ўтиши ҳодисаси кичик (10^{-18} см²/сек) диффузия коэффицентларини ўлчаш имконини беради.

Литийдан ташқари, калий ва натрийнинг кремнийдаги диффузияси ҳам ўрганилган.

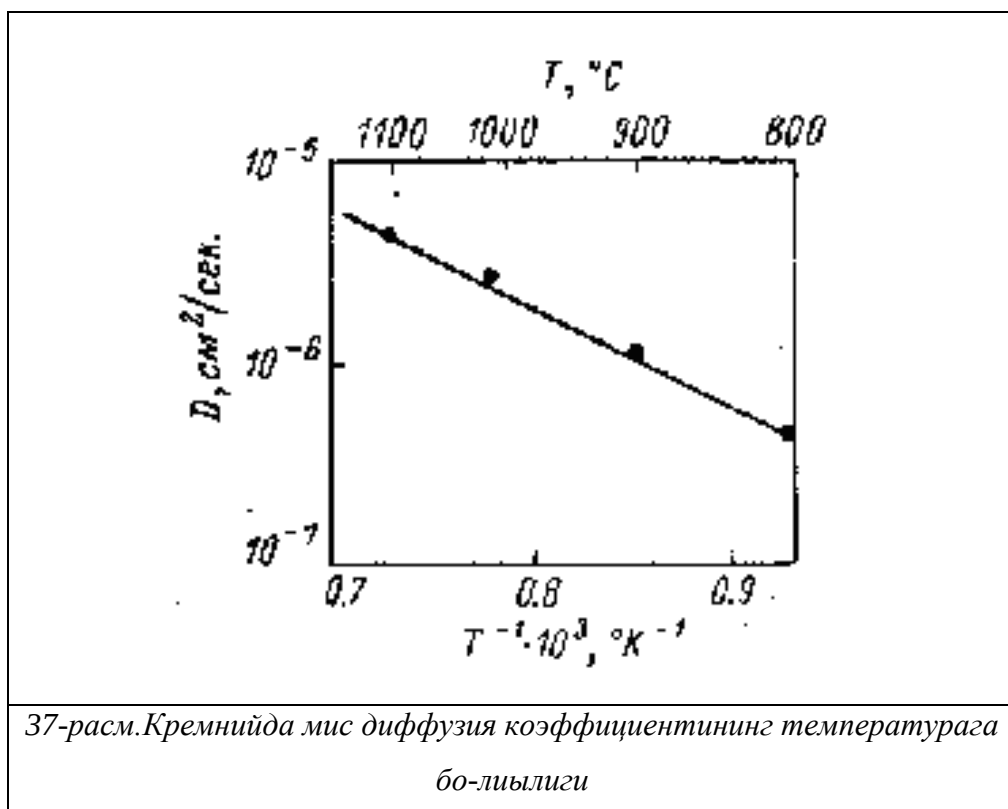
Барча ўрганилган ишқорий металллар тез диффузиялановчи донорлардир, улар суқилма қаттиқ эритмаларини ҳосил қилишади ва тугунлар оралиғи бўйлаб кўчишади.

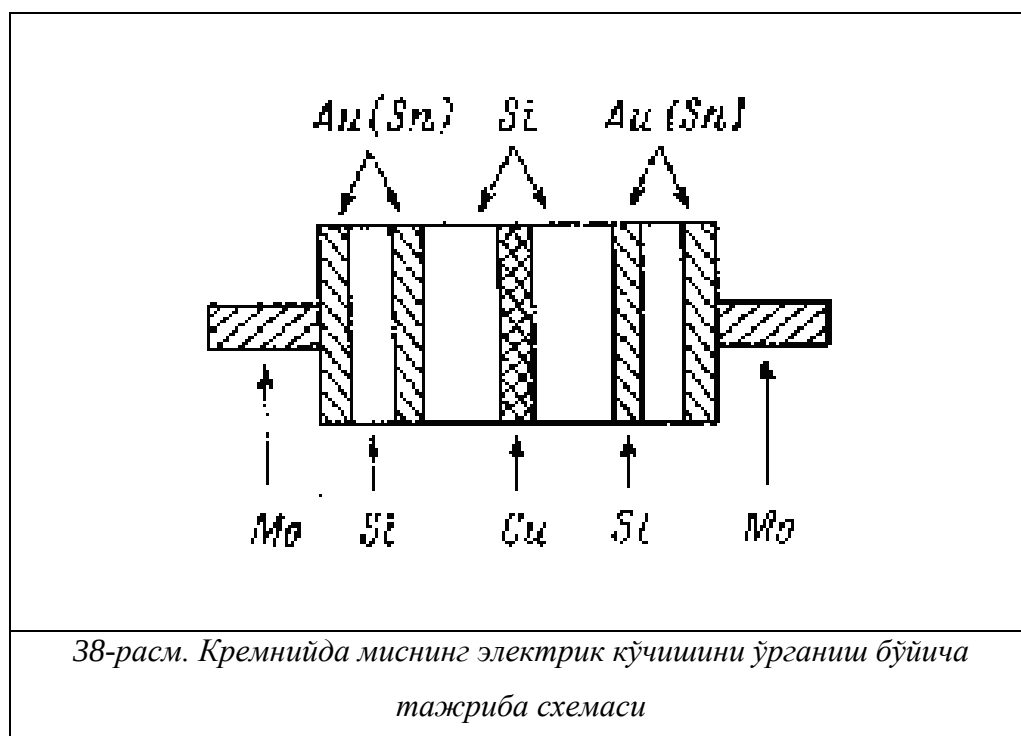
5.5. Кремнийдаги миснинг диффузияси

Кремнийда, германийдагидек, миснинг диффузия тезлиги аномал катта. Биз олган маълумотлар бўйича $800 \div 1100^\circ\text{C}$ да миснинг диффузия коэффициентини $4 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{сек}$ дан $4 \cdot 10^{-6} \text{ см}^2/\text{сек}$ гача ўзгаради.

Кремнийдаги миснинг диффузия коэффициентини германийдагидан 15-20 марта кам (солиштирилаётган температураларда). Бундай фарқ кучли боғланишлар ва шунга мувофиқ равишда кремнийнинг суюлиш температуралари германийникидан юқори бўлиши билан тушунтирилади.

Кремнийда миснинг диффузияси (37-расм) доимий электр майдон таъсири остида тезлашиши ёки секинлашиши мумкин. Миснинг Si га ўтишини Галлерх томонидан бажарилган ўлчашларининг кўрсатишича, 1100°C яқинида мис мусбат ион Si^+ кўринишида ҳаракатланади.





38- расмда схематик равишда Галлерх фойдаланган тажриба схемаси кўрсатилган. Радиактив мис Si^{64} манбаси молибденли электродлар оралиғига қисилган икки кремний наъмуналари орасига жойлаштирилган. Наъмунанинг қарама-қарши чет ёқлари олтин ёки қалай билан мисни боғлаб олиш учун, қўшимча электрод олди Si эса намуналар температурасини ва текширилаётган намуналарда электр майдоннинг нотекикликларини йўқ қилиш учун киритилган.

Диффузияга таъсир қилувчи электр майдоннинг ҳарактерини аниқлаш ва диффузия коэффицентини ҳисоблаш учун қабул қилувчининг юза бирлигига тўпланган мис атомлари миқдори (алоҳида анодда Q_+ ва катодда Q_-) аниқланади. У ўлчашларнинг нисбати орыали ифодаланади

$$\frac{Q_+}{Q_-} = \exp \frac{uE}{D} . \quad (V,4)$$

Бу ердан uE/D миқдорини, Эйнштейн муносабатидан фойдаланган ҳолда диффузияланувчи зарралар зарядини аниқлаш мумкин. Галлахер олган натижалар 3-жадвалда келтирилган.

3-жадвал. Кремнийда миснинг электр майдонида диффузияси

T, °C	E, В/см	$Q_a \cdot 10^{-14}, \text{см}^{-2}$	$Q_k \cdot 10^{-14}, \text{см}^{-2}$	q
1000	1.96	1100	15	0.83

1060	1.43	180	5.2	1.15
1080	1.49	290	2.9	0.94
1125	1.44	310	7.6	1.23
1135	0.99	150	3.0	1.22
1200	1.46	150	7.3	1.03

Жадвалдан кўриниб турибдики, катодда (Q-) чўкаётган мис миқдори анодда (Q+) ўтираётган мис миқдоридан деярли икки тартибга кўп. Демак, кремнийда мис мусбат ионлар кўринишида бўлади. Бу ионлар заряди +1 га тенг (тажриба хатоликлари чегарасида).

Галлахер баҳоси бўйича 1100⁰ С да кремнийда эритилган миснинг умумий миқдоридан 35% и тугунлар оралиғида мусбат ионлар кўринишида ҳаракат қилади. Бу ионларнинг ҳаракатчанлиги $u=2,7 \cdot 10^{-5}$ см² /сек.(1120⁰С да) га тенг, бу миқдор $D=3,2 \cdot 10^{-5}$ см² /сек диффузия коэффициентига тўғри келади.

Бу тадқиқотлар кремнийда миснинг диффузия механизми худди германийдагидек эканлигини кўрсатади.

5.6. Кремнийда 3d-элементларнинг диффузияси

Кремний монокристаллида киришмаларнинг фазовий тақсимооти унинг электрофизик хусусиятларини шакллантиришда асосий роль ўйнайди. Шунинг учун кремнийдаги ва умуман барча яримўтказгичлардаги киришмалар диффузиясини ўрганиш шу кунгача яримўтказгичлар физикасининг долзарб муаммоларидан бири бўлиб қолмоқда.

Бу ерда кремний монокристаллида 3d ўтиш элементларининг диффузия параметрларини ҳисоблаш ҳақида сўз боради. Маълумки, бу элементлар кремнийда асосан тугунлар ораси бўйича диффузияланиб, Si таиқланган соҳасида чуқур энергетик сатҳлар ҳосил қилади, яхши эрувчан ва диффузия коэффициентлари юқори бўлиб, температурага

$$D=D_0 \exp (-E /kT), \quad (V.5)$$

кўринишда боғланган, бу ерда D_0 – экспонента олди кўпайтмаси, E -диффузияни фаолланиш энергияси.

Кремнийда 3d-элементлар диффузияси кўп муаллифлар томонидан тадқиқ қилинган [1-3], лекин улар томонидан аниқланган диффузия коэффициентларининг қийматлари бир-биридан кескин фарқ қилади. 4-жадвалда бу элементлар учун D_0 ва E катталиклар ҳамда уларнинг орбитал радиуслари ва атом массаларининг қийматлари келтирилган.

4-жадвал. Кремнийда 3d-элементларнинг параметрлари.

параметрлар	Ti	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	манба
$R, \text{\AA}$	1.48	1.24	1.28	1.23	1.18	1.14	1.13	1.06	
$M, \text{г/моль}$	48	52	55	56	59	59	64	65	
$D_0, \text{см}^2/\text{с}$	$2 \cdot 10^{-5}$	10^{-2}	$2.6 \cdot 10^{-1}$	$6.2 \cdot 10^{-3}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$2.3 \cdot 10^3$	$4 \cdot 10^{-2}$	10^{-1}	[1]
	$9 \cdot 10^{-3}$	$6.9 \cdot 10^{-4}$	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$9.7 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-4}$	-	-	[3]
$E, \text{эВ}$	1.5	1.0	1.5	0.66	0.5	0.47	1.0	1.5	[1]
	2.05	0.81	0.63	0.68	0.37	0.47	0.18	-	[3]

Эксперимент натижаларини назарий таҳлил этиш D_0 ва E коэффициентларни

$$D_0 = A_1 + B_1x + C_1/x, \quad (\text{V.6})$$

$$E = \ln(A_2x^2 + B_2x + C_2), \quad (\text{V.7})$$

кўринишларда ифодалаш мумкинлигини кўрсатади, бу ерда $x = r/M$.

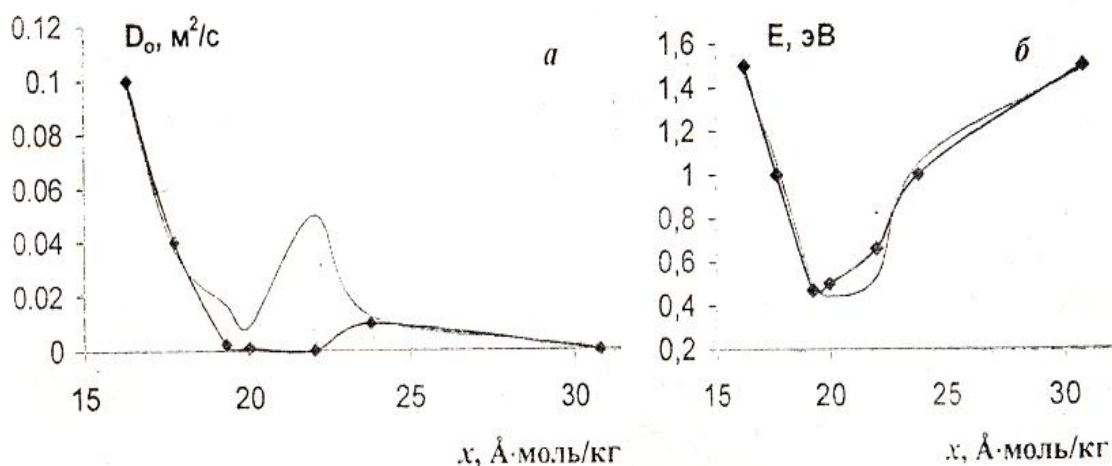
Энг кичик квадратлар усули ёрдамида аниқланган A, B, C коэффициентларнинг ҳамда ҳисоблаш аниқлигини кўрсатувчи χ^2 нинг қийматлари 5-жадвалда келтирилган.

5-жадвал

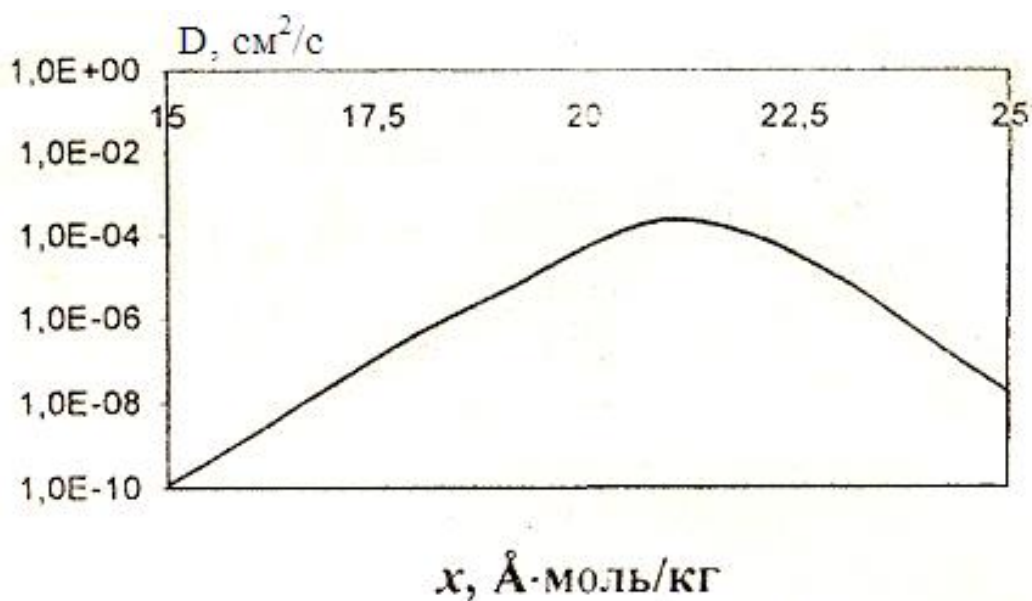
A_1	B_1	C_1	χ^2	A_2	B_2	C_2	χ^2
-5.8	0.15	55.45	10^{-3}	0.14	-5.98	63.56	10^{-3}

39-расмларда D_0 ва E энергиянинг x параметрга боғланишининг назарий ва экспериментал натижалари графиги келтирилган. 39-а расмдан кўришиб турибдики, D_0 коэффициент 2 та экстремумга эга. Улардан биринчиси $x=20$ ($r=1,18 \text{ \AA}$, $M=59 \text{ г/моль}$) даги минимум бўлиб, **Co** элементига мос келади, иккинчиси эса $x=23,8$ ($r=1,24 \text{ \AA}$, $M=52 \text{ г/моль}$) даги максимум бўлиб, **Cr** элементига га мос келади.

39-б расмдан E коэффициентнинг $x=19,3$ ($r=1,14 \text{ \AA}$, $M=59 \text{ г/моль}$) да минимумга эга бўлиши ва у **Ni** элементига мос келиши кўришиб турибди.



39-расм. D_0 (а) ва E (б) ларнинг $x=r/M$ га боғлиқлиги; нуқталар – эксперимент натижалари, узлуксиз чизиқ – ҳисоблаш натижалари.



40-расм. Диффузия коэффициентини D нинг $x=r/M$ га боғлиқлиги.

(V.6) и (V.7) ифодаларни (V.5) формулага қўйсак, кремнийда барча 3d-элементларининг диффузия коэффициентларининг x параметрга боғланишини битта формула билан ифодалаш мумкин эканлиги келиб чиқади:

$$D = (A_1 + B_1x + C_1/x) / \sqrt{A_2x^2 + B_2x + C_2} \quad (V.8)$$

3d-элементлар учун x параметр $\sim 15 \div 35$ оралиқдаги қийматларнигина қабул қила олади. (V.8)-ифоданинг бу оралиқдаги дифференциал таҳлили у $x \approx 21$ да экстремумга эга бўлиши ва у $\mathbf{Co}$ га мос келишини кўрсатади (40-расм).

Олинган натижалар [1, 2]-ишлардаги ўлчаш натижаларига анча яқиндир.

D_0 коэффициентда иккита, E ва D коэффициентларда эса биттадан экстремум нуқталарнинг бўлиши уларнинг электрон структураси билан боғлиқ эканлигини ва уларни тадқиқ этишни давом эттириш кераклигини кўрсатади.

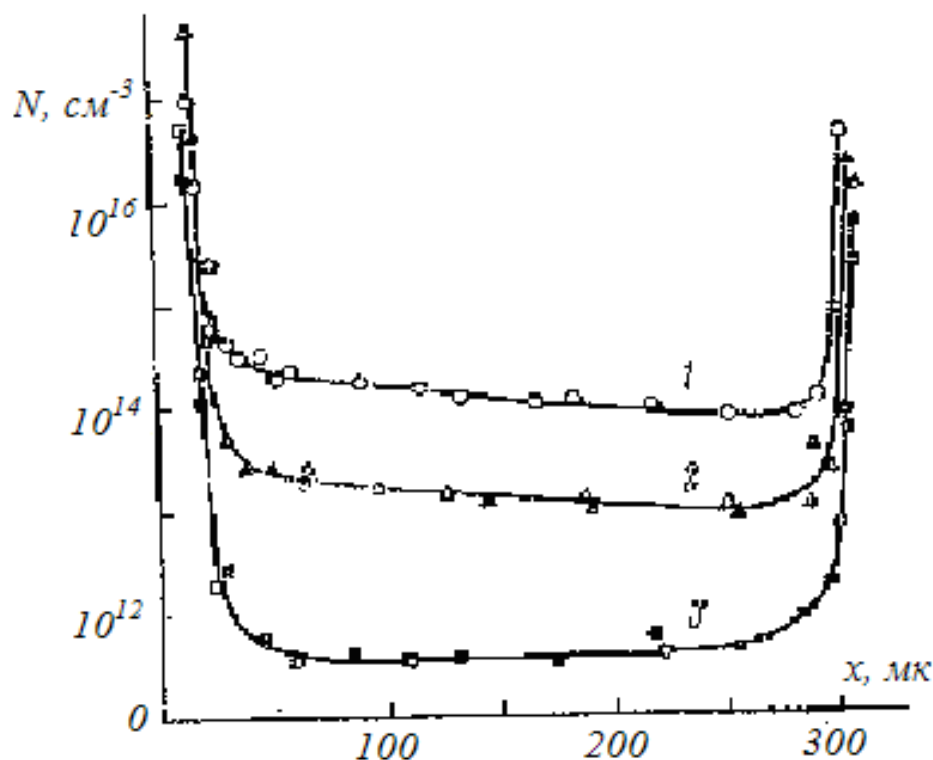
5.7. Кремнийда тез диффузияланувчи киришмалар

Кремнийда, германийдек, диффузиянинг катта тезлиги, литий, мисдан ташқари кумуш, олтин, темир ва рухга ҳам хос, улар электр хоссаларига кўра кремнийда акцептор бўладилар. Темир гуруҳидаги бошқа элементлар ҳам катта диффузия коэффициентига эга бўлишини кутиш мумкин. Куйида шу пайтгача маълум бўлган экспериментал маълумотлар берилган.

Кумушнинг кремнийдаги диффузияси Ag^{110} (кумуш) изотопи ёрдамида нисбий солиштира қаршилиги 80 Ом·см га тенг p -турдаги монокристал намуналарда стандарт бирин-кетин “қобик ечиш” услуби бўйича текширилган. Диффузион қиздириш гелий билан тўлдирилган кварц ампулаларда ўтказилган. Кумуш силлиқланган Si намунаси сиртларига AgCl эритмасидан суртилган.

Тадқиқотларнинг кўрсатишича, кумуш кремнийда нисбатдан катта диффузия тезлигига эга экан. $1100 \div 1350^\circ\text{C}$ оралиғида Ag ни диффузия коэффициенти $3 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{сек}$ дан $2,4 \cdot 10^{-8} \text{ см}^2/\text{сек}$ га ўзгаради.

Биринчи марта олтиннинг кремнийдаги диффузиясини Стразерс ва кейинроқ Г.С.Куликов ва Р.Ш.Малкович ўрганишган. Кейинчалик бу масалага катта эътибор берилган бошланиши фақатгина олтиннинг текширишлар учун қулай объект сифатида қўлланилишигина эмас (катта нисбий активлик ва ярим парчаланиш даврининг Au^{198} изотопи учун унча кичик эмаслиги), балки унинг яримўтказгичли электроникада кремнийда асосий бўлмаган заряд ташувчилар яшаш даврини камайтириш учун асосий киришма сифатида қўлланилиши билан ҳам боғлиқ.



41-расм. Кремнийда олтин атомларининг тақсимооти

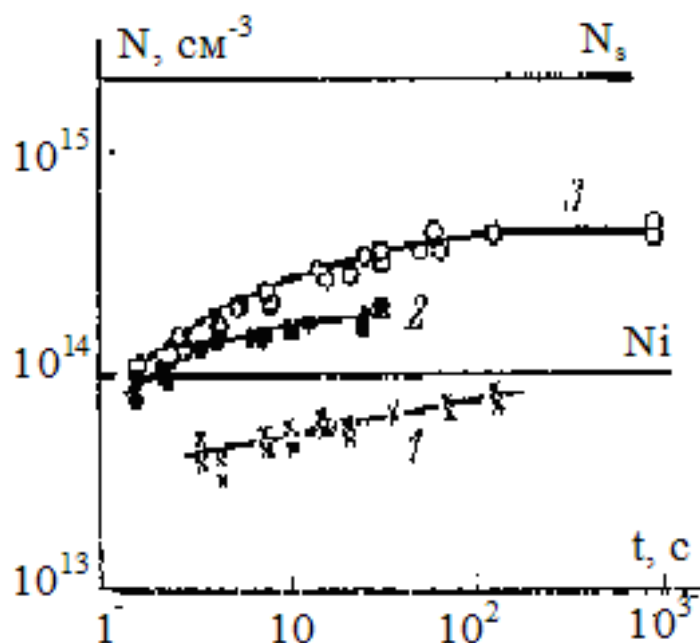
Тажрибада олинган олтиннинг зичлиги тақсимооти. одатда, мураккаб характерга эга (41-расм). Бунда намунанинг сирт олди соҳасида кузатилаётган олтин атомлари зичлигининг кескин кўтарилиши юзага ишлов бериш сифатига боғлиқ. Силлиқланган сиртли-намуналарда сирт олди соҳаларида зичлик сайкаллашган сиртли намуналарга нисбатан 100 марта ортиқ. Олтиннинг диффузия кинетикасига кремнийни легирланганлик характери ҳам таъсир кўрсатади, бунда бор (В) билан легирланган ковакли кремнийда диффузия тезлигини ўзгариши кузатилмайди. Фосфор билан легирланган кремнийда диффузия секинлашади.

Стразерс томонидан темирнинг кремнийдаги диффузияси текширилган. Тажрибалар 1100÷1250°C оралигида Fe^{59} радиоактив изотоп ёрдамида монокристал намуналарда ўтказилган.

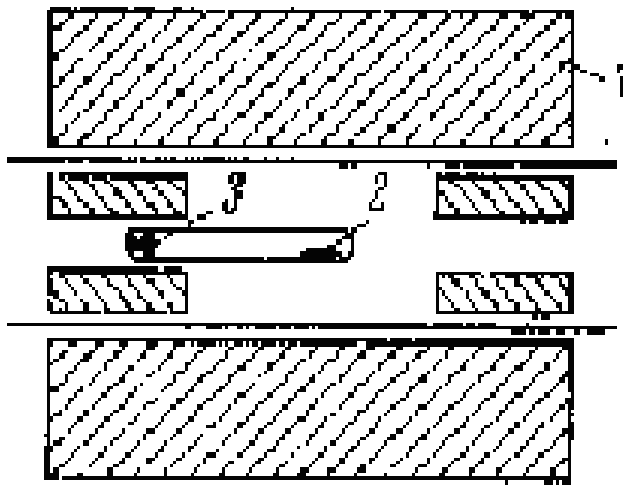
Коллинс ва Карлсоннинг аниқлашича, кремнийда темирнинг диффузияси икки хил диффузия коэффиценти билан характерланади. 1115°C да “тез” диффузия коэффиценти $5 \cdot 10^{-6} \text{см}^2/\text{сек}$ дан юқори бўлади, “секин” диффузия ўша температурада $7 \cdot 10^{-7} \text{см}^2/\text{сек}$ га тенг. Бунда темир донорли киришма бўлади. Никель ва кобальт эса акцепторлик хоссаларига ҳамда, юқори диффузия коэффицентларига эга.

Олтин ва темирнинг кремнийда диффузияси германийдагига нисбатан анча тезроқ бўлиши эътиборга лойиқдир. Бу айниқса, олтинга таалуқли, унинг кремнийда диффузияси

фаоллашиш энергияси германийдан 2,5 марта камроқдир (1,1 ва 2,48 эВ). 925⁰С да (бу германий эриш ҳароратидан 33⁰С га паст) олтиннинг германийдаги диффузия коэффиценти $9 \cdot 10^{-9} \text{см}^2/\text{сек}$ тенг, шу температурада кремнийда эса (кремний суюлиш температурасида 500⁰С паст) олтиннинг диффузия коэффиценти $2 \cdot 10^{-8} \text{см}^2/\text{сек}$ га тенг. Олтин диффузияси диссоциатив механизм орқали амалга ошади. Олтин атомлари панжаранинг тугунлар оралиғи бўйлаб тез ҳаракатланади ва вакансияларда ўтириб қолади. Олтиннинг Si да диффузияси механизмнинг хусусияти унинг эффектив эрувчанлиги наъмунанинг диффузион тўйиниш вақтига боғлиқлиги билан белгиланади (42-расм). Тўйиниш вақти ортиши билан эффектив эрувчанлик ортади. Бу олтин атомларининг ўрин алмашиниши ҳолатига ўтиши билан боғлиқ.



42-расм. Турли дислокация зичликларида олтин концентрациясининг вақтга боғлиқлиги



43-расм. Кремнийда Рух диффузиясини ўрганиш бўйича тажриба схемаси; 1- температура градиентли печ, 2-кремний намунаси, 3-рух бўлаги.

Германийдан фаркли ўларок, кремнийда тез диффузияланувчи акцептор киришма бўлиб рух ҳам ишлатилади. Кремнийда рухнинг диффузияси Фуллер ва Морин томонидан чуқур ўрганилган. Улар тажрибасида $\sim 1,0 \times 0,4 \times 0,06 \text{ см}$ ўлчамли ингичка пластинка кўринишида тайёрланган кремний намуналари рух бўғларида 900° дан 1360°C гача иситилган. Рух миқдори шундай танланганки, диффузия температурасида рух бўғлари $0,5 \div 1,5 \text{ атм}$ босим остида бўлган. Баъзи тажрибаларда буғ босими трубкада температура градиентини яратиш учун ўзгартиб турилган, трубкада кремний ва рух бўлаги жойлаштирилган (43-расм).

Бироқ, бу тажрибаларда натижалардаги фарқни босим 7 дан 760 мм.с.м.уст. оралиғида ўзгарганда ҳам аниқлаш имкони бўлмади.

D нинг қиймати қуйидаги формула билан аниқланди:

$$D = \frac{(fd)^2}{5,1t}. \quad (\text{V},5)$$

Бундай ҳисоб учун намунанинг ўртача қаршилигига тўғри келувчи ҳаракатчанлик катталигидан фойдаланилган. Рухнинг тўлиқ ионланишини таъминлаш учун, маргумуш билан легирланган n- турдаги кремний намуналари қўлланилган. Унинг миқдори -рух

билан тўйингандан кейин намуна n-турдаги ўтказувчанликни сақлаб қолиш учун етарли қилиб олинган.

Рухнинг кремнийдаги диффузия коэффициентининг олинган барча қийматлари $10^{-6} \div 10^{-7} \text{ см}^2/\text{сек}$ оралиғида ётади. Худди шу қийматлар рухнинг кремнийдан буғланишини текширишда, шунингдек электр майдони таъсирида зарралар кўчиши тажрибаларида ҳам олинган.

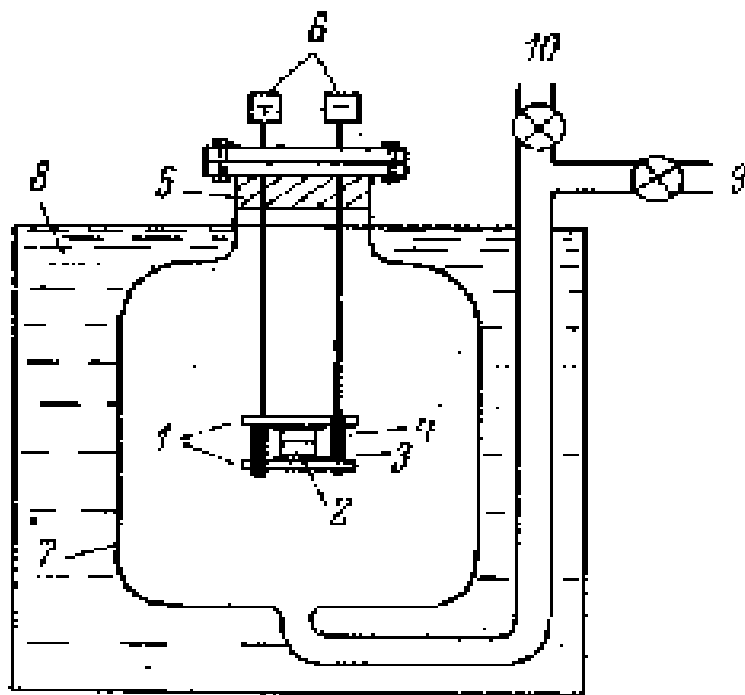
Бир хил температурада қиздирилган турли намуналарда диффузия коэффициенти учун маълумотларнинг бир-биридан катта фарқини ҳам айтиб ўтиш лозим. Миснинг германийдаги диффузиясида ҳам шундай ҳолат ўринлидир ва бу ҳолат намуналардаги дислокациялар зичлиги билан ҳам бевосита боғлиқ ҳолда бўлишлиги аниқланган.

Рух ва темир гуруҳи элементларининг диффузия коэффициентларининг катта қийматлари текширилган температуралар оралиғида бу элементларнинг диффузияси тугунларора характериға эға эканлиғиға асос беради. Бундай температураларда айтиб ўтилган элементлар атомлари тугунлар оралиғида ионлашган ҳолатда бўлганлиғи сабабли, улар ўзларини донорлар сифатида кўрсатишлари лозим.

Масалан, рухнинг кремнийда диффузия ҳолатида икки марта ионлашган донорлик энергетик сатҳи (икки электрон ажралиши сабабли) пайдо бўлиши керак. Бироқ, тажрибада аниқланишича, паст (ва хона) температураларида рух кремнийда иккита акцепторлик сатҳини ҳосил қилади, бу эса фақат рух атомларининг тугунлар оралиғидан тугунларға ўтиши ва диффузиянинг диссоциатив механизми сабабли рўй беришини тақозо қилади.

Бу ерда кўриб чиқилган кўп зарядли акцепторларнинг диффузия механизмини тушунтириш учун III-V-гуруҳ элементлари киришмалари билан легирланган кремний намуналарида паст температураларда уларнинг диффузиясини текшириш қизиқарли бўлар эди. Бу элементлар ва кўп зарядли акцепторлар ўртасидаги ўзаро таъсир бирикмалар ҳосил қилишға олиб келади ва диффузия тезлиғи, эрувчанлик, шунингдек ушбу намуналарда ток ташувчиларининг тарқалиш характери ўзгаришиға олиб келади. Охирги вақтларда бундай текширишлар киришмаларнинг кремнийда эрувчанлигини аниқлаш учун бажарилган.

5.8. Доимий электр майдонининг олтин ва кумуш атомларининг кремнийдаги диффузиясига таъсири



44-расм. Яримўтказгичларда киришмаларнинг электр майдонида кўчишини ўрганиш қурилмаси.

1-Зангламайдиган пўлатли электрод, 2- намуналар, 3-тантанли пластинка, 4-изоляцияловчи втулкалар, 5- мис қобик, 6-ток ўтказувчилар, 7-шиша идиш, 8-сув, 9-сўриб олиш найи, 10- гелийни киритиш найи.

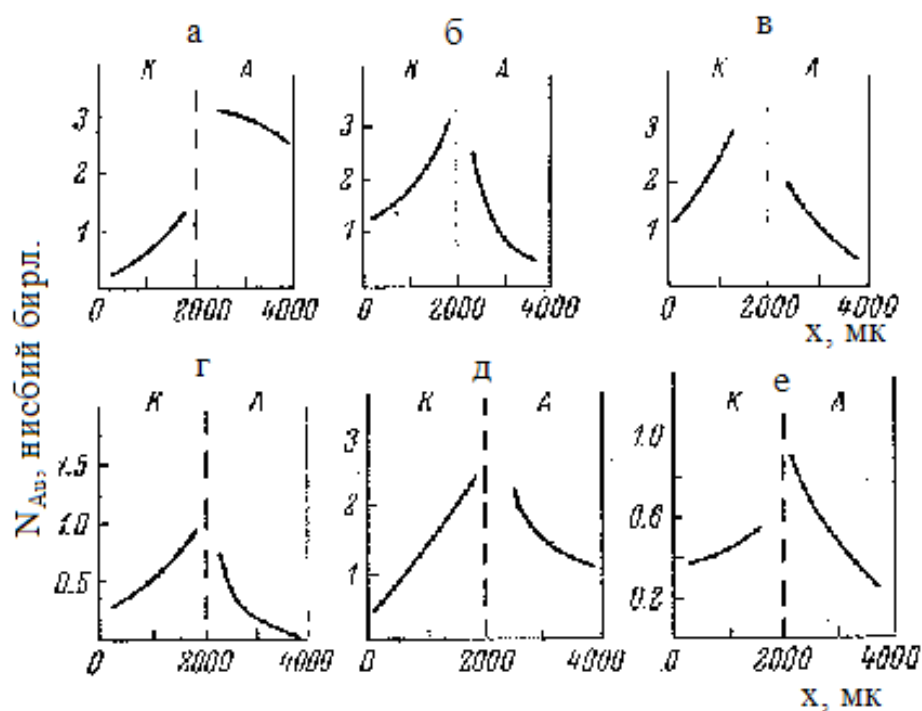
Яримўтказгичларда тез диффузияланувчи киришмалар ҳаракатини электр майдон ёрдамида ҳам бошқариш мумкин. Бунинг учун киришмаларнинг ионланиш характерини турли температураларда билиш зарур.

Г.С.Куликов, Р.Ш.Малкович ва Сюэ Шин томонидан доимий электр майдоннинг олтин ва кумушнинг кремнийдаги диффузиясига таъсири текширилган. Тажрибалар юқори температураларда олтин учун $1075 \div 1350$ °С да, кумуш учун $1280 \div 1350$ °Сда ўтказилди. Тажрибалар услуби қуйидагидан иборат бўлган. Иккита ясси параллел

кремний намуналари ҳар бирининг ўлчами $5 \times 5 \times 2 \text{ мм}$ бўлиб кремнийнинг битта куймасидан қирқиб олинган. Улар махсус рамкада бир-бирига, олдиндан олтин ёки кумушнинг радиоактив изотопи суртилган силлиқланган юзалари билан қисилган. Рамка қисиб олингандан кейин гелий билан тўлдирилган шиша колбачага жойлаштирилади. Ташқаридан колба оқиб турган сув билан совитилади (44-расм). Рамканинг ток олиб келувчи электродлари ва текшириладиган намуналар ўртасига танталли лентадан ингичка прокладкалар жойлаштирилади. Улар электродларнинг боғловчиси бўлиб хизмат қилади, баъзи тажрибаларда шунингдек температуранинг тенглаш учун хизмат қилувчи кремнийли пластинкалар ҳам қўлланилади. Намуналарни қиздирувчи электр майдонни ҳосил қилиш учун намуналар орқали доимий ток билан ўтказилади. Намуналар температураси оптик пирометр ёрдамида совитувчи сув ва колба шишасини нурланишни ютиш тузатмаларни эътиборга олган ҳолда ўлчанади. Электр майдонининг қуввати намуна орқали ўтказилган ток катталиги ва намунанинг нисбий қаршилиги кўрсаткичи бўйича ҳисобланади. Электр майдони ёрдамида кўчиришдан кейин танталли прокладкалар активлиги ва намуна қалинлиги бўйлаб киришма атомлар тақсимланиш зичлиги ўлчанади.

4-жадвал. Кремнийда олтиннинг электр майдонида қўчиш

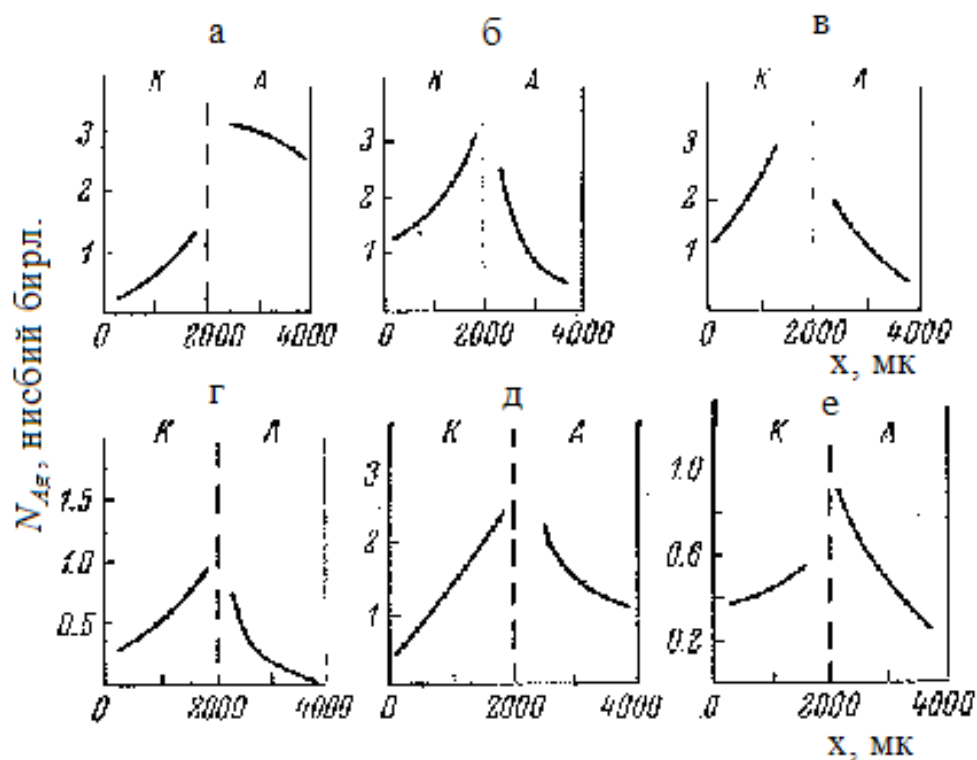
$T, ^\circ\text{C}$	$T, \text{соат}$	Ўтиш йўналиши	$T, ^\circ\text{C}$	$T, \text{соат}$	Ўтиш йўналиши
1075	16.37	Катодга	1250	7.0	Анодга
1125	16.0	»	1300	5.42	»
1150	12.0	»	1320	2.66	»
1250	22.0	Анодга	1350	2.72	»



45-расм. Кремнийда олтиннинг электр майдонида кўчиши

Тадқиқотларнинг кўрсатишича, (5-жадвал ва 45-расм), 1200°C дан юқори температурада олтин анодга, паст температурада катодга йўналади. Кумуш $1280 \div 1350^{\circ}\text{C}$ ораликда катодга йўналади (46-расм). Ҳақиқатда, кутилганидек, юқори температураларда олтин ва кумуш кремний кристал панжарасининг тугунлар оралиғи бўйлаб мусбат ионлар кўринишида ҳаракатланади.

Ажабланарлиси шуки, олтин 1200°C дан юқори температураларда анод томонга ўтади. Бундай кичик температура интервалида у ўз зарядини “+” дан “-” га ўзгартиришини тасаввур қилиш қийин. Кейинги текширишлар аниқлашича, олтиннинг анодга йўналиши электронлар булути билан олтин ионларини эргаштириш эффекти билан юзага келади. Унинг назарияси юқорида баён қилинган (§ 5, III боб).



46-расм. Кремнийда кумушининг электр майдонида кўчиши

5.9. Кремнийда газларнинг диффузияси, эрувчанлиги ва сингиши

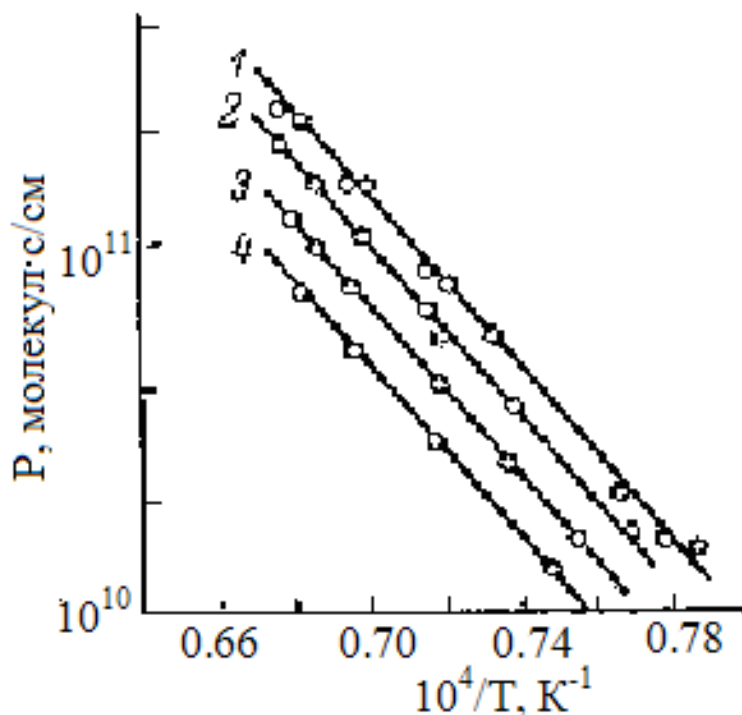
Кремнийда гелий ва водороднинг диффузияси, эрувчанлиги, сингиши Вириген ва Вармольц томонидан масс-спектрометрик анализ ёрдамида тадқиқланган. Улар олган натижалар 5-жадвалда келтирилган.

5-жадвал

T, °C	$D \cdot 10^6, \text{cm}^2/\text{сек}$	$S \cdot 10^{-16}, \text{cm}^{-3}$	$P \cdot 10^{-10}, \text{cm}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$
1092	1.70	3.4	5.7
1115	1.80	4.1	7.4
1127	1.80	4.7	8.4
1132	1.76	5.4	9.4
1195	2.23	9.8	21.9
1199	2.30	10.0	23.0
1200	2.17	11.2	24.3

Гелийнинг кремнийдаги диффузиясининг активлашиш энергияси 1,26 эВ, шу энергиянинг германийдаги катталигидан анча юкори (0,7 эВ). Шу билан бир вақтда

гелийнинг кремнийда эриш иссиқлиги (0,48 эВ), германийдагидан (0,57 эВ) бир мунча кам.



47-расм. Кремнийда водород атомларининг эрувчанлиги

Кремний панжарасида водород H_2 молекула кўринишида бўлади ва қисман, у ерда мавжуд бўлган кислород билан боғлиқ бўлиш эҳтимоли бор. Кичик температура соҳасида водород кремнийда ток ташувчиларни бермайди. Водороднинг кремнийда турли температураларда эрувчанлиги ҳақидаги маълумотлар 45-расмда берилган.

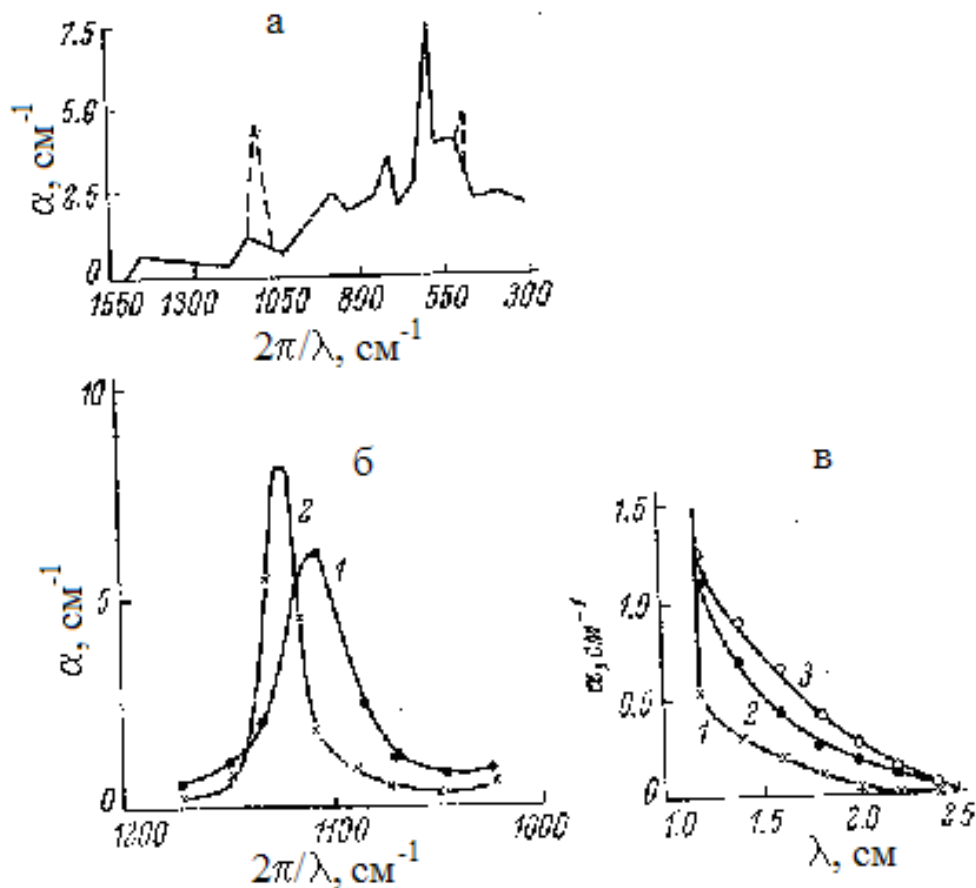
Неон, аргон ва азотнинг кремнийда сингиши унча катта эмас: 1200^0C да $-5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1} \cdot \text{сек}^{-1}$.

Кремний намунасида газларнинг катта миқдори борлиги масс-спектроскопик анализлар ва бошқа текширишларда ўз тасдиғини топган. Масалан, Папазян ва Вольский германий ва кремний намуналарида турли газларнинг зичликлари учун олган маълумотлар 6-жадвалда келтирилган.

6-жадвал

Элемент	H	O	C	N
Ge	$2.5 \cdot 10^{18}$	$3.6 \cdot 10^{18}$	$2.3 \cdot 10^{18}$	йўқ
Si	$1.7 \cdot 10^{19}$	$1.5 \cdot 10^{19}$	$1 \cdot 10^{18}$	»

Кремний куймасида катта миқдорда кислороднинг борлиги-ўзига хос бўлган бу кристалларда ёруғлик ютиш сохалари ҳосил бўлишига олиб келади: тўлқин спектри кремний учун тахминан 9 мк, германий учун 11,6 мк узунлигига мос бўлади. Кайзер ва Кек, шунингдек Смакула ва Калнайсларнинг кўрсатишича, ютишнинг оптик коэффиценти катталиги 9 мк да ўлчанганда кремнийнинг турли намуналарида бу катталик кислород миқдorigа боғлиқ ҳолда ўзгаради (48-расм).



48-расм. Кремнийда инфрақизил нурланишнинг ютилиши

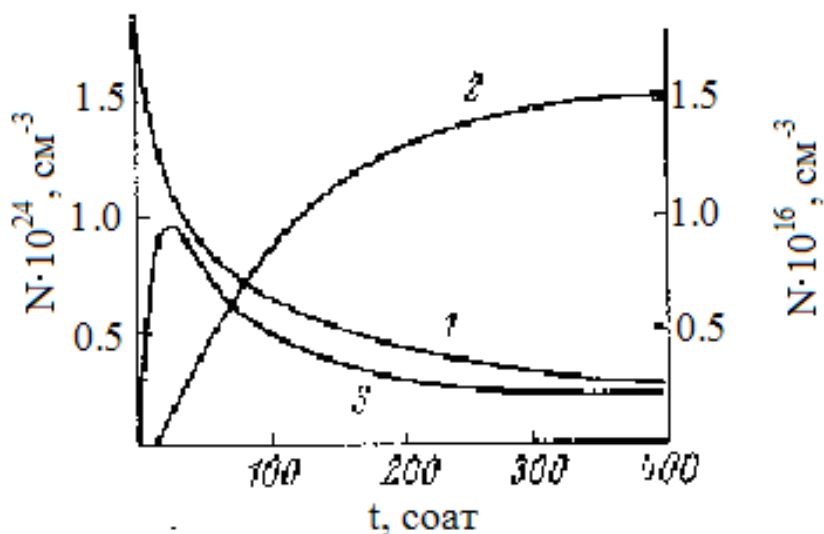
Логан ва Петерс кислороднинг кремнийдаги диффузиясини ўрганганлар. Кремнийни кислород атмосферасида қиздиришдан кейин ҳосил бўлган диффузион қатлам қалинлигини аниқлаш учун, улар 2 усулдан – кремнийда кимёвий едирилиш чуқурчаларини кузатиш ва қўшимча термик ишловдан кейин диффузион қатламнинг электрик хоссаларини текшириш усулларида фойдаландилар.

Биринчи усул-дислокацияларнинг чиқиш жойи бўлган едириш чуқурчаларининг ўлчамлари намунадаги кислород миқдorigа боғлиқлиги аниқланган. Кислород қанча кўп бўлса, чуқурчалар ўлчами шунча кичик бўлади, кристал юзасида бир вақтда едиришнинг фақат бир услубида ҳосил бўлган чуқурчалар бўлади. Кремний намуналарини кислородда ёки вакуумда қиздириб, кислород билан тўйинган ёки сийраклашган қатламлар ҳосил

қилишга эришилди, уларнинг қалинлигини едириш чуқурчаларининг ўлчами ўзгариши бўйича аниқлаш мумкин.

Иккинчи усул кремнийга термик ишлов бериш вақтида махсус эффектлар юзага келиши билан боғлиқ, кремнийни паст температурада қиздириш ($300\div 600^{\circ}\text{C}$) намуналарнинг электрон ўтказувчанлигининг ортишига олиб келади. Бунда электронлар зичлиги кислород кўп бўлган шароитда тайёрланган намуналарда кўпроқ (кварц тикли, кислородли муҳит) ва кислород йўқ шароитда олинган намуналарда камроқ бўлади (вакуум, водород атмосфераси).

Кремнийда кислород диффузиясини текширишда термоконверсияни кузатиш услуги бўйича р-турдаги кремний намуналари кислород атмосферасида диффузион қиздирилиб юқори температурада ва кейин қўшимча равишда 450°C да иситилган. Қўшимча иситиш юзада n- турдаги кремний қатлам ҳосил бўлишига олиб келган, унинг чуқурлигини температура ва диффузион қиздириш вақтига боғлиқ бўлиб, термозонд, олтинни чўктириш ёки бошқа услублар ёрдамида аниқлаш мумкин. Кремнийда кислороднинг диффузия тезлиги бу ўлчашларга биноан 1300°C да $1,8\cdot 10^{-10}$ $\text{cm}^2/\text{сек}$ ни ташкил қилади.



47-расм. Кислород, SiO_2 , SiO_4 ларнинг концентрацион эгри чизиқлари

Кайзер, Фриш ва Райс кислород-Si қаттиқ эритмасининг парчаланишини текшириш орқали кремнийни паст температураларда термаишлов беришда термодонорлар ҳосил бўлиш тушунтирдилар. Si кристалл панжарасида жойлашган кислород исиклик ишлов вақтида диффузия натижасида маълум бир нуқталарда тўпланади. (масалан, дислокацияларда, SiO_2 , SiO_4 , $(\text{SiO}_2)_n$ кўринишдаги атомлар агрегатлари). Тахмин қилинадики, кристаллнинг донорлик хоссалари асосан SiO_4 бирикмалари асосида бўлади,

$(\text{SiO}_2)_n$ киришмалар эса электр ноактив ҳолатда бўлади. SiO_4 бирикмалар парчаланувчи каттик эритмаларнинг оралик ҳолати бўлганлиги боис, улар донорлар зичлиги термоишлов вақтига боғлиқ.

5.10. Германий ва кремнийда киришмаларнинг диффузия механизмидаги баъзи фарқлар тўғрисида

Кремний ва германий бир хил тузилишли ва физик-кимёвий хоссалари бир-бирига жуда ўхшаш бўлган яримўтказгич элементлар бўлгани учун, уларда киришма атомлар диффузияларининг ҳам тўлиқ ўхшашлиги бўлиши керакдек туюлади. Аммо, бундай эмас. Масалан, агар германийда V группа элементлари- донорлар III группа элементларига нисбатан, деярли икки тартибга тез диффузияланса, кремнийда эса бунинг акси: V группа элементлари (донорлар) III группа (акцепторлар) элементларига нисбатан бир-икки тартибга секинроқ диффузиялашади. Баъзи киришма элементлари (масалан, олтин ва рух) кремнийда германийга нисбатан тезроқ диффузияланади, шу вақтнинг ўзида кремнийда атомлараро боғланиш мустаҳкамлиги германийга қараганда юқорироқ.

Германий ва кремнийда турли элементлар диффузиялари тезликлари орасидаги бундай номутаносиблик, Свелиннинг кўрсатишича, германий ва кремнийдаги вакансиялар ҳолатларидаги бирмунча фарқлар мавжудлигидандир.

Вакансиялар кремний ҳам германийда ҳам акцепторлардир. Бироқ, германийда вакансияларнинг акцепторлик сатҳи ман қилинган соҳанинг пастки ярмида валентли соҳадан ўртача 0,26 эВ юқорида жойлашган, кремнийда эса у ман қилинган соҳанинг юқори ярмида ўтказувчан соҳа тубидан 0,16 эВ пастда жойлашган. Шунинг учун бир хил температураларда германийда кремнийдан кўра кўпроқ зарядланган вакансиялар бўлади. Бу германий ва кремнийдаги диффузия механизмларига ўзига хослик беради. Юқорида айтиб ўтилганидек III ва V гуруҳ элементлари учун уларнинг вакансиялар бўйлаб ҳаракатланишига таъсир қилади. Германийда бу ҳолда зарядланган киришма атомлар ва зарядланган вакансиялар ўртасида электростатик ўзаро таъсирлашув ўринлидир, бунда мусбат зарядли киришма ионлар манфий зарядланган вакансияларга тортилади. Бу уларнинг ҳаракатланишини енгиллаштиради, манфий киришма ионлар итариладилар, бу уларнинг кристал бўйлаб ҳаракатини қийинлаштиради. Кремнийда кўпчилик вакансиялар нейтрал ҳолатда бўладилар ва улар билан киришма ионлар ўртасида электростатик кулонли ўзаро таъсир бўлмайди.

Германий ва кремнийда донор ва акцептор элементларнинг диффузия коэффициентларининг қийматларини баҳолаш учун 3-4 бобдаги формулалардан фойдаланамиз.

7-жадвалда V ва III гуруҳ элементларнинг акцептор ва донор ҳолатларидаги ион радиуслари келтирилган, шунингдек $\Delta H_8 \approx \frac{6\pi(r_8 - r_8')^2 r_8'}{Z(1 + \alpha)\chi'}$ формуладан топилган германий ва кремний учун ΔH қиймати. Германий ва кремнийнинг ионли радиуси учун 1.22 ва 1.17 Å қабул қилинган.

7-жадвал. V ва III гуруҳ элементларнинг акцептор ва донор ҳолатларидаги ион радиуслари

Ион			
B ⁻	0.75	6.0	5.7
Al ⁻	1.74	7.5	10.3
Ga ⁻	1.58	3.0	4.2
In ⁻	1.68	3.8	5.3
Te ⁻	1.64	3.5	5.0
P ⁺	0.77	4.0	3.8
As ⁺	0.96	1.5	1.1
Sb ⁺	1.19	0	0
Bi ⁺	1.32	0.1	0.2

Зарядланган вакансиялар ва ионлар ўртасидаги кулонли ўзаро таъсир

$$\Delta U_c = \pm \frac{q_v q_i}{\chi d} \text{ формуладан келиб чиққан ҳолда германий учун } \pm 0,36 \text{ эВ } (\chi = 16),$$

кремний учун $\pm 0,46 \text{ эВ}$ ($\chi = 12$). $\mu - E_o$ қиймати германий учун 0,05 эВ кремний учун 0,29 эВ [53].

$$D = \frac{1}{8} a^2 v \exp\left(\frac{\Delta S_v + \Delta S_i}{k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_v + \Delta U_s + \Delta U_j}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right],$$

$$\frac{D_i}{D_{co}} = \exp\left(-\frac{\Delta U_s}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(\frac{\mu - E_v - \Delta U_c}{kT}\right)\right]$$

формулалардан фойдаланиб ва ΔH_v , ΔH_c ва $\mu - E_v$ қийматини қўйиб D_i / D_{co} ни германий ва кремнийда турли элементларнинг диффузияси учун ҳисоблаб топиш осон.

D_i / D_{co} нинг ҳисобланган ва тажрибаларда аниқланган қийматлари.

8-жадвал

Тур	Киришма	Ҳисоб	Тажриба	Тур	Киришма	Ҳисоб	Тажриба
Германий(800 ⁰ С)				Кремний(1200 ⁰ С)			
р	Al	5	0.2	n	Bi	1	1
	Ga	4	1		Sb	1	1
	In	6	2		As	1.5	2
	B	15	3	р	In	1.2	5
n	P	580	45		Tl	1.2	5
	Bi	90	130		B	1.8	15
	Sb	90	130	n	P	4.0	15
	As	180	230	р	Ga	0.8	20
					Al	9	70

Олинган натижалар 8-жадвалда келтирилган. Ўша ерда бу катталикларнинг тажрибавий қийматлари ҳам берилган.

Акцептор характерли киришма ва асосий модданинг ион радиусларида анча катта фарқлар, донор ва асосий моддага нисбатан (кремний ва германий), акцепторларнинг донорларга қараганда диффузия тезлигининг юқори бўлишига олиб келиши керак. Кремнийда кузатилишича, бу ердаги жараён ионлар ва зарядланган вакансиялар ўртасида электростатик ўзаро таъсир билан ҳисобланмайди (чунки $\mu - E_v < 0$). Германийда эса бу таъсир диффузия тезлиги ортишига олиб келади. Донорлар учун каттароқ ($\Delta H_c < 0$) ва акцепторлар учун кичикроқ ($\Delta H_c > 0$).

D_i / D_{co} ни топишда германий учун шунингдек, киришма ионлари ва вакансиялар орасида кулонли ўзаро таъсир ҳам инобатга олинган, чунки

$$\mu - E_v > 0 \quad \text{оқибатида вакансияларнинг асосий қисми зарядланган.}$$

Юқорида баён қилинганлар нега Si да акцептор киришмалар донорларга нисбатан тезроқ диффузияланиши, шу вақтнинг ўзида Ge да бунинг акси бўлади деган саволга жавоб беради.

5.11. Кремнийда термик нуқсонлар

Кремнийни қайта ишлашда юзага келувчи термик нуқсонларни (ТН) ўрганишга бир қатор тажрибавий ишлар бағишланган. Уларнинг кўпчилигида ТН изоляцияланган

нуктали нуқсонлар сифатида эмас, балки донор туридаги бирикмалар сифатида ифодаланади. Бундай донорлар Si га кристални 350°C дан 1300°C гача оралиқда ишлов беришда киритилиши мумкин. Кремний кристалларида тахминан 10^{16}см^{-3} гача миқдордаги донорли марказлар $350\text{--}500^{\circ}\text{C}$ гача термик ишловда юзага келади. Кайзернинг оптик ва электрик усуллар билан кўрсатишича, ТН лар миқдори кристалдаги кислород миқдорига боғлиқ бўлиб, унинг ортиши билан зичлик ҳам ортади. Бунда ТН ўз таркибига биноан SiO_4 туридаги бирикмаларни намоён қилади деб тахмин қилинган.

Бошқа томондан, баъзи ишларда кислороднинг ТН хоссаларига бўлган таъсирини инкор килувчи натижалар ҳам келтирилади. Масалан, Бемски ва Диас Siни 600°C дан 800°C гача қиздиришда юзага келувчи ТН зичлиги кремнийни эритмадан тортиш йўли билан ва зонали суюлтириш техникаси йўли билан олинган бошланғич кристаллардаги миқдорига боғлиқ эмаслигини кўрсатиб бердилар. Шундай қилиб, ТН табиатини ҳали яна ўрганиш зарур. Жумладан, юқори температурада юзага келувчи бирикмаларнинг вакансиялар ёки бошқа нуқтавий нуқсонлар билан ўзаро таъсири ҳақидаги масала ҳам ўз ечимини кутмоқда.

ТН ҳосил бўлиш энергияси миқдорини тажриба шароитида баъзи ишларда ТН зичлигининг термик ишловдан кейин чиниқтириш тезлигига ҳам боғлиқлиги аниқланди.

Турли муаллифлар маълумотларига кўра ТНларнинг фаолланиш энергияси $E_0=2,5\div1,8$ эВ га тенг. Бунда E_0 кристални киришма билан легирлаш даражасига боғлиқ бўлиб, унинг ортиши билан камаяди. ТН $300\div1025^{\circ}\text{C}$ температураларда қиздирилганда уларни зичлиги хона температурасидан анча юқори температураларда юз бериши кузатилди. ТН қуйдиришни температурага боғлиги чизмаларидан уларнинг миграция энергияси миқдори ҳисоблаб чиқилди. E_m кристалдаги дислокациялар зичлигига боғлиқлиги ва $E_m=0,6$ эВ да дислокациялар зичлиги 10^4см^{-2} дан юқори бўлиши аниқланди. Муаллифлар фикрича, ТН вакансиялар гуруҳидан иборат. Бемски ва Диас ТН ларга хона ҳароратида иссиқлик ишлови беришни таъсирини кузатдилар. ТН зичлигининг вақт бўйича ўзгариш чизмаларидан $E_m=0,3$ эВ эканлиги аниқланди ва хона температурасида ТН диффузия коэффиценти ҳисоблаб чиқилди: $D\approx 1,2\cdot10^{-7}\text{см}^2/\text{сек}$ ва у кристалдаги кислород миқдорига боғлиқ эмас эканлигини кўрсатдилар. Муаллифларнинг таъкидлашича, ТН тугунлараро атомларга хос нуқсонлар туридир. Свэнсон маълумотларига кўра ТН миграция энергияси $0,81$ эВ га тенг. ТН вакансия-киришма атом кўринишидаги бирикмалардир.

Шундай қилиб, турли муаллифлар маълумотларига кўра, ТН миграция энергияси миқдори $0,3\text{--}1$ эВ оралиғида ётади. Термик нуқсонлар кремнийнинг ман қилинган соҳасида электронлар учун маҳаллий энергетик сатҳлар яратадилар ва материалнинг

электрик ва фотоэлектрик хоссаларини ўзгартирадilar. Свэнсон фотоўтказувчанлик спектри бўйича 78 К да ТН лар донор сатҳларининг ионизация энергияси-ни аниқлади: $E_v + 0,4\text{эВ}$. Ионланиш энергиясининг шунга яқин миқдорлари Холл эффектнинг температуравий боғлиқлигидан оlinди.

Кремнийда ТН ҳосил бўлиш энергия миқдори Ge га нисбатдан одатда кўпроқ (~2,5 эВ), миграция энергияси (0,3÷1 эВ) камроқ эканлигини (~2 эВ ва 1,2÷1,3 эВ) таъкидлаш лозим.

Мутлоқ катталиқ бўйича маҳаллий сатҳларнинг ионланиш энергияси қиймати, термик нуқсонлар билан кремнийда юзага келувчи, германийдаги ионланиш энергиясининг мутлоқ қийматидан 2 мартадан кўпроқ. Кўп ҳолларда кремнийда ТН донор туридаги бирикмалар сифатида кўрилади, германийда эса улар акцептор бўлади ва моновакансия сифатида кўрилади.

Назорат саволлари

1. Кристалларда атомларни нейтронлар ёрдамида фаоолаштириш механизми?
2. Саёз ҳолатли атомлар диффузиясини алоҳида белгилари?
3. Тез фаоллашувчи атомлар билан легирлаш механизмлари?
4. Киришма ионларининг электронлар оқими билан эргаштириш эффекти?
5. Кремнийда термик нуқсонлар ҳосил бўлиш механизмлари?

6-БОБ. ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАРДА КИРИШМАЛАРНИНГ ЎЗARO ТАЪСИРЛАШУВИ

6.1. Киришмалар ўзарo таъсирлашувининг кўринишлари

Фазавий мувозанатлар термодинамикасидан кристалда эриётган киришмалар концентрацияси химиявий потенциаллар мувозанати орқали аниқланади. Агар ҳар бир фаза бир хилдаги идеал нуксонлардан ташкил топган бўлса, улардаги парциал химиявий потенциаллар

$$\mu_i = g_i^0 + kT \ln C_i \quad (\text{VI.1})$$

кўринишда бўлади, бу ерда C_i – нуксонлар концентрацияси, g_i^0 – бирлик нуксоннинг эркин энергияси. Умумий химиявий потенциал парциал химиявий потенциаллар йиғиндисига тенг бўлади.

Кристалдаги киришма атомлари эрувчанлигини тавсифлаш учун кристалнинг ва нуксонларнинг идеаллигига эътибор бериш керак. Бунда киритилаётган киришма концентрацияси нуксонлар концентрацияси тартибида бўлиши керак. Одатда бу олдиндан аниқ бўлмайди. Агар қандайдир нуксон катта g_i га эга бўлса, кичик концентрацияда ҳам кучли таъсир этиши мумкин. Бу икки ноаниқликлар мумкин бўлган ҳар қандай нуксон кристалдаги эрувчанликни таҳлил қилганда тўла ҳисобга олишни кўрсатади.

Шундай қилиб, гетероген кристалдаги мувозанат таркибловчилар химиявий потенциаллари мувозанатлашганда рўй беради. Бу шарт атомлар орасидаги ўзарo таъсир бўлмаганда содда кўринишда бўлади. Лекин ўзарo таъсирнинг бутунлай йўқ бўлиши қаралаётган системага кескин чегара қўйиш бўлади.

Киришмалар ионизацияси мувозанат жараёнларига ва элементлар эрувчанлигига таъсир кўрсатади. Буни ҳисобга олиш учун химиявий потенциалга электроннинг химиявий потенциаллини қўйиш керак бўлади. Бу тўла ва парциал эркин энергиянинг ўзгаришидир.

Киришмалар ўзарo таъсири иккига бўлинади: ташқи ва ички. Улардан биринчиси кристалнинг ташқи муҳит билан ўзарo таъсирини ифодалайди. Иккинчиси ички ўзарo таъсир бўлиб, кристалнинг эркин энергиясини ўзгартиради. Бу ўзарo таъсирлар қуйидаги синфларга бўлинади:

- статик – кристал панжарадаги таркибий элементларнинг силжиши;

- зарядли — заряднинг сақланиш қонунини таъминловчи, кристалда қўшимча потенциал ҳосил қилмайдиган ўзаро таъсирлар;
- потенциал — кристал потенциал энергияси ошиши ҳисобига эркин энергиянинг ўзгаришига олиб келувчи турли ўзаро таъсирлар йиғиндиси;
- ассоциатив (бирикмалар ҳосил қилувчи)- ассоциация ва бирикмалар ҳосил бўлишига олиб келувчи, яъни янги ва кристал панжара бўйлаб яхлит ҳаракатлана оладиган ўзаро таъсирлар.

6.2 Статик ўзаро таъсирлар

Статик ўзаро таъсирлар таркибий элементлар ва киришмаларнинг кристал панжара бўйлаб жойлашиши билан боғланган. Таркибий элементлар йиғиндиси, киришмалар таркиби ва симметрияси уларнинг жойлашиш усуллари аниқлайди ва Больцман формуласи билан аниқланувчи конфигурацион энтропияни белгилайди:

$$S_{\text{конф}} = k \ln W \quad (\text{VI.2})$$

бу ерда W — макроскопик ҳолатларни аниқловчи термодинамик эҳтимоллик.

Идеал кристални фақат бир йўл билан, яъни барча атомларни ўз тугунларига жойлаштириб ҳосил қилиш мумкин. Берк системанинг ўз энтропиясини оширишга ҳаракат қилиши тартибсизликларни келтириб чиқариб, нуқсонлар ҳосил бўлишига олиб келади.

Статик ўзаро таъсирнинг пайдо бўлиши иккита объект бир жойни эгаллай олмаслигидан келиб чиқади. Шунинг учун уларни аралаштириш керак. Бундай аралаштиришлар сони энтропияга ўз улушини қўшади.

Кристалнинг тўла Гиббс энергиясини

$$G = N\mu(P, T) \quad (\text{VI.3})$$

кўринишда фақат бир компонентли система учун ёзиш мумкин. Лекин кристал кўп фазали ва кўп компонентли бўлади.

Агар статик ўзаро таъсирдан бошқа ҳамма ўзаро таъсирлар ҳисобга олинмаса, ҳажм бирлигидаги тўла Гиббс энергияси

$$G = \sum g_i N_i - TS_{\text{конф}} \quad (\text{VI.4})$$

кўринишда бўлади, буерда g_i - мос парциал эркин энергиялар, N_i — элементлар концентрацияси.

Бу формулада химиявий потенциаллар эмас, балки парциал эркин энергиялар ишлатилган. Чунки атомлар учун бу катталиклар бир хил. Вакансия учун химиявий

потенциалнинг маъноси йўқ, чунки вакансиядан ташкил топган муҳит – бу вакуумдир. Кристал ташқарисида вакансия бўлмайди. Шу билан бир вақтда эркин энергия учун вакансия улуши шак шубҳасиз бор. Буни атомлар ёки атом ва вакансия бирикмалари учун ҳам айтиш мумкин.

Бирикма фақат кристал чегарасида бўлиши мумкин ва унинг эркин энергияси атомлар химиявий потенциаллари, таркибий элементлар ўзаро таъсир энергияси ва бирикманинг кристал матрица билан ўзаро таъсир энергиясини ташкил этади. Бу ҳолда химиявий потенциал ҳақида гапириш мумкин эмас, чунки бу ерда бир компонентли модда йўқ.

Парциал эркин энергия объектлар ичидаги ўзаро таъсирни, химиявий потенциал эса атомлар орасидаги ўзаро таъсирни ҳисобга олади. Бунга атомлар ва бирикмалар энтропияларининг иссиқлик ташкил этувчилари ҳам киради.

Парциал Гиббс энергиясини

$$g_i = h_i - TS_{iT} \quad (VI.5)$$

кўринишда тавсифлаш мумкин, бу ерда h_i – парциал энтальпия, унга ички энергия ва ўзаро таъсир энергияси киради, S_{iT} – тебраниш ёки иссиқлик энтропияси.

Парциал эркин энергиядан ташқари тўла энергиядан N_i бўйича ҳосил қилинган конфигурацион энтропиядан ҳосилдан ташкил топади:

$$(\partial G / \partial N_i)_{T,P} = g_i - T(\partial S_{\text{конф}} / \partial N_i)_{T,P} \quad (VI.6)$$

Агар ҳосил фақат бир турдаги атомлар бўйича олинмаса, химиявий потенциал статик ўзгаришлар билан боғлиқ бўлган ва конфигурацион энтропиядан олинган ҳосил орқали ифодаланган қўшимчани олади:

$$\mu_i = \mu_i^0 - T(\partial S / \partial N_i)_{T,P} \quad (VI.7)$$

Бу формулани

$$\mu_i = \mu_i^0 + kT \ln x_i \quad (VI.8)$$

кўринишда ёзиш мумкин, бу ерда x_i – i - элементлар билан банд бўлган жойлар улуши.

(VI.6) формуладаги иккинчи ҳад конфигурацион энтропияни ҳисобга олувчи силжиш энтропиясидан олинган ҳосил натижасидир. (VI.7) ифодадан фарқли равишда унга кўп компонентлар силжиш энтропияси, уларнинг симметрик ва мумкин бўлган силжишларини ҳисобга олувчи ҳад киради.

Конфигурацион энтропиянинг шаклланишида турли таркибий элементлар (симметрияга эга бўлмаган) ва мураккаб тузилишга (хусусий симметрияга) эга бўлган объектлар киради. Бу симметрия кристал ўқлари бўйлаб турлича йўналиб, конфигурацион энтропиянинг ошишига олиб келади.

Бу зарралар ўтказувчанлик ва валент зонанинг бўш жойларига ва нуқсонлар энергетик ҳолатлари бўйича жойлашиши мумкин. Барча таркибий элементлар ва объектлар статистик ўзаро таъсирда иштирок этади.

Панжарада турли нуқсонларнинг жойлашишини кўриб чиқамиз.

1. Панжаранинг конфигурацион энтропияси N та тугунга N_v та вакансияни жойлаштириш усуллари

$$A = N! / (N - N_v)! \quad (VI.9)$$

Вакансиялар айнан бир хил бўлганлиги учун N_v та вакансияни жойлаштириш усуллари

$$W = N! / (N - N_v)! N_v! \quad (VI.10)$$

2. Турли нуқсонли панжара. Ҳар бир таркибий элемент панжарада бир-бирига боғлиқ бўлмаган ҳолда жойлашади. Шу билан бир қаторда хусусий атомлар сони

$$N_\beta = N - \sum N_\alpha \quad (VI.11)$$

Юқоридагига ўхшаш

$$W = N! / (N - \sum N_\alpha)! \prod N_\alpha! \quad (VI.12)$$

3. Таркибий элементлари кристалнинг химиявий ҳолатлари бўйича жойлашган панжара. Улар 2 ёки ундан ортиқ таркибловчили яримўтказгич панжара бўлаги ёки панжра бўлаги ва турли типли тугунлар орасидаги атомлар бўлиши мумкин.

Бу ҳолда умумий термодинамик эҳтимоллик алоҳида системалар бўйича жойлашган нуқсонлар эҳтимолликлари кўпайтмасига тенг. Бу ҳар бир жойлашиш бир-бирига боғлиқ бўлмаган ҳолда содир бўлиши натижасидир. Термодинамик эҳтимоллик

$$W = \prod N_\alpha! / (N - \sum N_\alpha)! \prod N_\alpha! \quad (VI.13)$$

орқали аниқланади.

4. Бирикмаларнинг яримўтказгич кристал панжараси бўйича жойлашиши. Бирикмаларни панжара бўйлаб жойлаштирилаётганда улар турли йўналишларда жойлашиши мумкинлигини ҳисобга олиш керак. Бирикма атомларидан бирини базис сифатида қабул қиламиз. Бу атом тугунларда ёки тугунлар орасида бўлиши мумкин. Лекин базис атомни ҳар бир ҳолатида бирикма турлича турлича жойлашиши мумкин. Бирикманинг базис атомга нисбатан бурилиши янги силжишни билдиради, уни термодинамик эҳтимолликни аниқлашда ҳисобга олиш керак.

Фараз қилайлик, бирикма базис атомга нисбатан g_k жойлашув ҳолатига эга бўлсин. Бу базис атомнинг ҳар бир ҳолати g_k марта айниганлигини билдиради. У ҳолда бир бирикмани ҳисобга олсак, термодинамик эҳтимоллик g_k марта, ҳаммасини ҳисобга олсак, $(g_k)^{N_k}$ марта ортади

$$W = N! g_k^{N_k} / (N - N_k)! N_k! \quad (VI.14)$$

Бирикманинг айланиш фактори қуйидагича ҳисобланиши мумкин. Идеал панжаранинг симметрия элементлари йиғиндиси нуқтавий гуруҳни ташкил этади. Хусусий симметрияга эга бўлган бирикма ҳосил бўлиши идеал панжара гуруҳининг рангини пасайтиради. Янги панжаранинг симметрияси эски тугуннинг кичик гуруҳи ҳисобланади.

Ҳақиқатан, реал кристални идеал кристал каби тасаввур қилиш мумкин, лекин симметрия камайганлиги учун операция камроқ бўлади. Кичик гуруҳнинг барча симметрия операциялари бирикмани ўша жойда қолдиради ва термодинамик ҳолатлар айлани ўхшаш бўлади.

Бирикма ориентациясини реал панжара қисм гуруҳига кирмаган операциялар ўзгартиради. Бу операциялар ўз қисм гуруҳини ташкил этади, у ҳам идеал панжаранинг қисм гуруҳи бўлади. Лагранж теоремасига асосан бирикманинг айланиш даражаси реал панжара қисм гуруҳи индексига тенг бўлади.

5. Электрон ва ковакларнинг жойлашиши. Бу жойлашув ўтказувчанлик ва валент зонасининг эркин ҳолатларига ва нуқсонларнинг электрон ҳолатларига бўлиш мумкин.

Электрон айланиши йўқ бўлганда ($n \ll N_c$), эркин электронлар зонадаги ҳажм бирлигидаги эффектив ҳолатлар зичлигига тенг бўлган айнан сатҳлар тўпламига тенг бўлади.

Бу ҳолатлар энергияси бир хил бўлганлиги учун N_c марта айланиган n та электронларнинг зона ичида жойлашиш эҳтимоллиги

$$W = (N_c)^n / n! \quad (VI.15)$$

формула орқали аниқланади, бу ерда $(N_c)^n / n!$ айланиш билан боғлиқ ҳолатлар сони. $n!$ айнан термодинамик ҳолатларни инкор қилади.

Худди шунга ўхшаш коваклар учун

$$W = (N_v)^p / p! \quad (VI.16)$$

n_d электронларни N нуқсонлар бўйича жойлаштиришнинг термодинамик эҳтимоллигини ҳисоблаш учун спинли айланишни ҳисобга олиш керак. Энг содда ҳолда (сатҳлар айланиши йўқ бўлганда) икки ҳол бўлиши мумкин.

1. Электрон бошқа электрон билан эгаллаган сатҳга жойлашади, у ўз спинини мослайди ва қолган жойни эгаллайди. Айланиш даражаси бирга тенг.

2. Электрон бўш сатҳга жойлашади ва иккита мумкин ҳолатдан бирини эгаллайди. Айланиш даражаси иккига тенг.

Агар сатҳ энергетик айланиган бўлса, айланиш даражасини адоҳида ҳисоблаш керак.

Спин бўйича айланиш ҳисобга олинганда термодинамик эҳтимоллик

$$W = N_{\alpha}^{\beta}! r_{\alpha}^{n_{\alpha}^{\beta}} R_{\alpha}^{N_{\alpha}^{\beta} - n_{\alpha}^{\beta}} / (N_{\alpha}^{\beta} - n_{\alpha}^{\beta})! n_{\alpha}^{\beta}! \quad (VI.17)$$

кўринишда ёзилади, бу ерда n - электрон билан тўлдирилган ҳолатларнинг айниш даражаси, p - эркин ҳолатлар.

Электронни жойлаштириш атомни жойлаштиришга боғлиқ бўлмаганлиги учун тонлашган нуксон ҳолат эҳтимоллигини ҳисоблаш учун (VI.12) ва (VI.17) ифодаларни кўпайтириш керак.

Бундан ташқари, эркин электрон ва ковакларнинг рухсат этилган зоналар бўйича жойлашувини ҳисобга олиш керак. Шундай қилиб, ионлашган атомлар учун термодинамик эҳтимоллик

$$W = (N_c)^n / n! (N_v)^p / p! N^\beta! (r_\alpha^\beta)^n (R_\alpha^\beta)^{N_\alpha^\beta - n} / (N^\beta - N_\alpha^\beta)! (N_\alpha^\beta - n_\alpha^\beta)! n_\alpha^\beta! \quad (\text{VI.18})$$

га тенг бўлади.

Юқорида термодинамик эҳтимолликни ҳисоблашнинг барча ҳоллари кўриб чиқилди. Конфигурацион энтропия Больцман формуласи (VI.2) асосида ҳисобланади.

Термодинамик эҳтимоллик билан системанинг статик ўзаро таъсирини характерловчи ҳосилани ҳисоблаймиз:

$$\partial S_{\text{конф}} / \partial N_\alpha^\beta = k \ln N_\alpha^\beta - n_\alpha^\beta / R_\alpha^\beta (N^\beta - N_\alpha^\beta) \quad (\text{VI.19})$$

Кўриниб турибдики, нуксонлар концентрацияси қанча кам бўлса, унинг ўзаро таъсир улуши шунча кам бўлади. Агар махраждаги нуксонлар сони ҳисобга олинмаса, ҳамма электронлар билан тўлдирилмаган нуксонлар билан банд бўлган жойлар киради.

Бундан фарқли равишда (VI.8) да атомлар билан тўлдирилган жойлар киради. (VI.8) да айниш даражаси йўқ. Бу (VI.7) (VI.8) га нисбатан статистик ўзаро таъсирни аниқроқ ҳисобга олади.

6.3. Зарядли ўзаро таъсир

Зарядли ўзаро таъсир – бу электромагнит ўзаро таъсирнинг бир кўринишидир. Ташқи электромагнит майдон бўлмаганда яримўтказгичли кристал ўз нейтраллигини сақлашга ҳаракат қилади. Шунинг учун барча зарядли заррачалар учун электр нейтраллик қонуни бажарилади.

Мусбат зарядлар йиғиндиси манфий зарядлар йиғиндисига тенг бўлганлиги учун

$$\sum_i Q_i = 0 \quad (\text{VI.20})$$

Бу қонунга кўра яримўтказгичда ковакларни тутувчи энергетик ҳолатлар юзага келса, эркин электронлар ёки электронларни тутувчи энергетик ҳолат юзага келиши керак. Бунга асосан

$$n + \sum_i N_{ai}^- = p + \sum_j N_{dj}^+ \quad (\text{VI.21})$$

Зарядли ўзаро таъсир икки каррали легирлашда муҳим аҳамиятга эга. Қўшимча донорлар киритилиши акцепторлар эрувчанлигини оширади ёки аксинча. Шунинг учун Гиббс энергиясини ёзишда донор ва акцептор ҳолатлар фарқини ҳисобга олиш керак.

Кристалга эҳтиётсизлик билан нуқсон киритиш бир жинсли бўлмаган куч майдонларини юзага келтиради. Бу майдонлар табиати ҳар хил бўлиши мумкин.

Нуқсонларнинг ионлашиши электромагнит майдонни юзага келтиради. Нуқсон пайдо бўлганда панжара чўзилади ёки қисилади, шунинг учун улардаги табиий флуктуациялар бир жинсли бўлмаган механик кучланишларни юзага келтиради. Шунингдек, гравитацион ўзаро таъсир ҳам бор, лекин уларни нуқсон ҳосил бўлишида ҳисобга олмаслик мумкин.

Куч майдони борлиги кристал энергиясини ўзгартиради, чунки ички энергия билан бир қаторда потенциал энергия ҳам юзага келади. Шунинг учун бу ўзаро таъсир потенциал ўзаро таъсир дейилади.

Бу ҳолда кристалнинг тўла энергияси Гиббс энергияси ва потенциал энергия йиғиндисига тенг бўлади

$$E = G + E_p \quad (\text{VI.22})$$

Куч майдони ўзгармайдиган кичик ҳажмда тўла энергиядан тўла дифференциал оламиз:

$$dE = (\partial E / \partial T)_{p,N} dT + (\partial E / \partial p)_{T,N} dp + \sum_i (\partial E / \partial N_i)_{T,p} dN_i \quad (\text{VI.23})$$

Потенциал энергияни температура ва босимга боғлиқ эмас деб ҳисоблаш мумкин, у ҳолда

$$dE = -SdT + Vdp + \sum_i (\partial G / \partial N_i)_{T,p} dN_i \quad (\text{VI.24})$$

Бу ерда биринчи ҳад куч майдони йўқлигидаги химиявий потенциал. Иккинчи ҳад зарранинг куч майдони билан ўзаро таъсир потенциали

$$\phi_i = (\partial E_p / \partial N_i)_{T,p} \quad (\text{VI.25})$$

Тўла энергия экстенсив параметр бўлганлиги учун (VI.3) га ўхшаш муосабатни ёзиш мумкин

$$E = \sum_i N_i \mu_i(P, T, F) \quad (\text{VI.26})$$

бу ерда Γ - куч майдони кучланганлиги. (VI.26) да

$$dE = \sum_i (N_i d\mu_i(P, T, F) + \mu_i(P, T, F) dN_i) \quad (\text{VI.27})$$

ни оламир. (VI.24) ва (VI.27) ни таққослаб,

$$\sum N_i d\mu_i (P,T,F) = -SdT - VdP \quad (VI.28)$$

$$\mu_i(P,T,F) = \mu_i(P,T,0) + \varphi_i \quad (VI.29)$$

ларни аниқлаймиз.

Шундай қилиб, куч майдонида химиявий потенциал зарранинг майдон билан ўзаро таъсир потенциалига ортади.

Ланно, Бргуэн монографиясида потенциал ўзаро таъсир кучи таъсир қилувчи деб номланган, чунки бу ўзаро таъсир масофада юз беради. Лекин электростатик майдон учун бу масофа унча катта эмас, 0.8 дан 80 гача. Шунинг учун потенциал ўзаро таъсир дейиш тўғрироқ.

Яримўтказгичли кристалларда нуқсонлар ҳосил бўлиш масалаларида заряднинг сақланиш қонуни аниқ бажарилади, шунинг учун кристалдаги электростатик майдон нолга тенг ва химиявий потенциал улуш бермайди.

Шунга қарамай электростатик майдонларда (VI.29) нинг бажарилишига кўп мисоллар келтириш мумкин. Энг аввало кучли электр майдонларида киришманинг активация энергиясини камайишини билдирувчи машҳур Френкель нуқсонидир. Бу нуқсон биринчи галда электрон билан Кулон потенциали ўзаро таъсирига эга бўлган марказлар учун ўринли. Электронни тортувчи Кулон ўзаро таъсири билан ташқи электр майдони қўшилишида активация энергияси

$$\Delta E_F = (e^3 / \pi \epsilon_S F)^{1/2} \quad (VI.30)$$

га камаяди, бу ерда F- электр майдон кучланганлиги, ϵ_S - яримўтказгичнинг диэлектрик сингдирувчанлиги.

Кучли электр майдонларида нуқсон ҳосил бўлиши кам ўрганилган ва электр майдонининг нуқсон ҳосил бўлиш энтальпиясига таъсири ҳақида маълумотлар йўқ.

Электростатик майдонлар шунингдек, нуқсон ионизацияси билан ҳам боғлиқ. У ионнинг заряд ҳолати билан аниқланадиган нуқтавий зарядга эга. Ионларнинг ўзаро таъсир энергияси

$$\Delta E = z_1 z_2 e^2 / 4 \pi \epsilon_S r \quad (VI.31)$$

га тенг, бу ерда -ўзаро таъсирлашувчи ионларнинг заряд ҳолатлари, r- улар орасидаги масофа.

(VI.31) формула тақрибий ҳисобланади, чунки у электростатик ўзаро таъсирдан бошқа таъсирларни ҳисобга олмайди. Лекин, унга таяниб, ўзаро таъсир характери сифат жиҳатдан таҳлил қилиш мумкин.

Агар нуқсонлар ишораси ҳар хил бўлса, улар тортишади ва ўзаро таъсир энергияси манфий бўлади. Шунинг учун Кулон ўзаро таъсири бирикмалар ҳосил бўлишининг

сабабларидан биридир, чунки уларнинг тортишиши бирлашишга олиб келади. Лекин бу ягона сабаб эмас.

Электростатик ўзаро таъсирда бирлашишга олиб келмайдиган иккита хол бўлиши мумкин.

1. Бир хил ишорали нуксонлар, уларнинг энергияси мусбат.
2. Бир хил ишорали кам ҳарактчан нуксонлар, улар бирлашиш учун бир-бирларига яқин кела олишмайди.

Бу паст температураларда содир бўлиши мумкин. Бир томондан паст температураларда диффузия коэффиценти кичик бўлади, иккинчи томондан, электростатик ўзаро таъсир радиуси энергияси энг катта эҳтимолли энергияга тенг бўлади. Температура пасйиши билан бу радиус ортади, шунинг учун биз кўраётган хол эҳтимоллиги катта бўлади.

N та тугундан иборат кристалнинг Гиббс эркин энергиясини кўрамиз, унда N концентрацияли зарядланган киришмаларнинг статистик тақсимои (VI.29) ни ҳисобга олган холда турғун жуфтлар ҳосил бўлиш шартидан

$$G = \mu_{\beta} N_{\beta} + (\mu_{\alpha} + \varphi_{\alpha\gamma}) N_{\alpha} + (\mu_{\gamma} + \varphi_{\gamma\alpha}) N_{\gamma} - kT \ln W \quad (VI.32)$$

Жуфтликлар ҳосил бўлмаганлиги учун киришмалар тугунларга бир-бирига боғлиқ бўлмаган холда жойлашишади. Бундан ташқари, киришмалар тўла ионлашган, шунинг учун электрон ва коваклар жойлашишини кўриш шарт эмас

$$W = N! / (N_{\beta} - N_{\alpha} - N_{\gamma})! N_{\alpha}! N_{\gamma}! \quad (VI.33)$$

Электростатик ўзаро таъсир потенциали

$$\varphi_{\alpha\gamma} = \varphi_{\gamma\alpha} = Z_{\alpha} Z_{\gamma} e^2 / 4\pi \epsilon_s r_{\alpha\gamma} = Q / r_{\alpha\gamma} \quad (VI.34)$$

ифода билан аниқланади, бу ерда $r_{\alpha\gamma}$ - нуксонлар орасидаги ўртача масофа, $Q > 0$ – итарилиш учун, $Q < 0$ тортишиш учун.

Нуксонлар панжара тугунларида статистик тақсимлангани учун улар орасидаги ўртача масофани

$$r_{\alpha\gamma} = (N_{\alpha} + N_{\gamma})^{-1/3} \quad (VI.35)$$

ифода орқали баҳолаш мумкин.

Кристал энергияси

$$G = \mu_{\beta} N_{\beta} + \mu_{\alpha} N_{\alpha} + Q N_{\alpha} (N_{\alpha} + N_{\gamma})^{1/3} + \mu_{\gamma} N_{\gamma} + Q N_{\gamma} (N_{\alpha} + N_{\gamma})^{1/3} - kT \ln W \quad (VI.36)$$

кўринишни олади. Бу ердан

$$\partial G / \partial N_{\alpha} = \mu_{\alpha} + 5/3 Q \sqrt[3]{N_{\alpha}} + N_{\gamma} - kT [\ln(N_{\beta} - N_{\alpha} - N_{\gamma}) - \ln N_{\alpha}] \quad (VI.37)$$

химиявий потенциалга электростатик ўзаро таъсирни ҳисобга олувчи қўшимча қўшилганлигини кўриш мумкин. Бу киришмалар концентрацияга таъсир қилади. (VI.37) дан

$$N_{\alpha\beta} = N^{\beta} \exp(-\mu_{\alpha\beta}/kT - 5Q/3kT \sqrt[3]{N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}}) \quad (\text{VI.38})$$

(VI.38) формула соддалашган алгоритм асосида олинди ва тақрибий ҳисобланади. Хусусан, унда электростатик экранлаш билан боғлиқ бўлган Дебай-Хюкел тузатмаси ҳисобга олинмаган. Лекин экранлаш эффекти ҳаракатчан заряд ташувчиларни талаб қилади. Электролитларда улар бор. Қаттиқ жисмларда эса киришмалар ҳаракати экранлаш учун етарли эмас. Шунинг учун яримўтказгичларда экранлаш эркин заряд ташувчилар ҳаракати билан боғлиқ.

Шунга қарамай (VI.38) формула киритилаётган киришмалар ўзаро таъсири натижасида бир-бирига таъсир этишини билдиради. Агар $Q > 0$ бўлса киришмалар бир-бирини итаради ва уларнинг эрувчанлиги кичик. Бу кучли легирланган ягона киришма учун ўринли, чунки концентрация ортиши билан ўртача масофа камаяди ва эрувчанлик пасаяди. Агар $Q < 0$ бўлса, киришмалар тортишишади, ўзаро эрувчанлик ортади.

Эластик ўзаро таъсир ролини кўрамыз. Панжарада нуқсон пайдо бўлганда у чўзилади ёки сиқилади. Қайта зарядланиш жараёнлари қўшимча реакцияни юзага келтиради ва электрон-фонон ўзаро таъсир ҳисобига панжара кутбланади.

Шунинг учун деформация билан боғлиқ қўшимча энергия юзага келади. Бу энергия жуфтлашиш ёки бирикиш ҳисобига камайиши мумкин. Шунинг учун деформация бирикмаларнинг баъзи кўринишларини юзага келишига сабаб бўлади. Эластик кучланиш дислокация ҳосил бўлиши ҳисобига йўқ бўлиши мумкин.

Бизни биринчи навбатда нуқсон ҳосил бўлиш жараёнларига эластик кучланишлар қандай таъсир этиши қизиқтиради. Шунинг учун юқоридаги ҳисоб-китобларни такрорлаб, эластик кучлар тақсимланишини қандай баҳоланишини таҳлил қиламиз.

Эластик ўзаро таъсир масалалари Лейбфрид ва Бройер [8] монографиясида батафсил ёритилган. Унда нуқсоннинг ташқи эластик деформациялар билан ўзаро таъсири ва ўзаро деформация ҳосил қилувчи икки нуқсон ўртасидаги ўзаро таъсир энергияси ҳисоблаб чиқилган. Бу энергия γ^{-1} бўйича қаторга ёйилса, асосий куч $\sim \gamma^{-3}$ каби бўлади. Шунинг учун ўзаро таъсир потенциалини

$$\phi_{\alpha\gamma} = \sigma/\gamma^3 = P_o^{\alpha}/4\pi e_{11}\gamma^3 [S_p\{P^b\} - 3(\check{R}, P^b \check{R})] \quad (\text{VI.39})$$

кўринишда танлаймиз. У ҳолда эркин энергия

$$G = \mu_{\beta} N_{\beta}^{\beta} + \mu_{\alpha} N_{\alpha}^{\beta} + \mu_{\gamma} N_{\gamma}^{\beta} + \sigma [N_{\alpha}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}) + N_{\gamma}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta})] - kT \ln W \quad (\text{VI.40})$$

Бу ердан

$$\partial G / \partial N_{\alpha}^{\beta} = \mu_{\alpha}^{\beta} + 2\sigma (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta}) - kT [\ln(N^{\beta} - N_{\alpha}^{\beta} - N_{\gamma}^{\beta}) - \ln N_{\alpha}^{\beta}] \quad (\text{VI.41})$$

Бу ердаги иккинчи ҳад нуқсонлар ўртасидаги эластик ўзаро таъсирни ҳисобга олади. Бу ўзаро таъсир нуқсонларнинг ўзаро эрувчанлигига таъсир қилади. (VI.41) дан

$$N_{\alpha}^{\beta} = N^{\beta} \exp(-\mu_{\alpha}^{\beta} / kT - 2\sigma / kT (N_{\alpha}^{\beta} + N_{\gamma}^{\beta})) \quad (\text{VI.42})$$

Кўриниб турибдики, нуқсонлар концентрацияси ўзаро таъсир потенциалига ва эластик кучланиш туфайли юзага келадиган нуқсонлар концентрациясига боғлиқ бўлади.

Шундай қилиб, ташқи куч майдонлари ва нуқсон ҳосил бўлиши билан боғлиқ ички майдонлар кристал энергиясининг ўзгаришига олиб келади. Химиявий потенциалга кучлар ўзаро таъсири билан боғлиқ қўшимчалар қўшилади. Натижада нуқсонлар концентрацияси ўзаро таъсир потенциалига боғлиқ равишда ўзгаради.

Нуқтавий нуқсонлар ҳосил қилувчи потенциаллар қисқа таъсир қилувчидир. Шунинг учун бу эффектлар кучли легирланганда юзага келади.

Шуни ҳам айтиш керакки, ташқи майдонлар тортувчи Кулон марказлари учун Френкель эффектига ўхшаш эффектларни келтириб чиқариши мумкин. Яъни ташқи майдон нуқсон ҳосил бўлиши нуқсонлар ҳосил бўлиш энтальпиясининг камайишига ва уларнинг концентрацияси ошишига олиб келади.

Қуйидаги 3 та шартни қаноатлантирувчи эритмалар идеал дейилади

- 1) Таркибловчиларининг парциал ички энергияси эритма концентрациясига боғлиқ эмас. Ички тўла энергия таркибловчилар ички энергиялари йиғиндисига тенг.
- 2) Таркибловчининг парциал моляр ҳажми силжишда ўзгармай қолади.
- 3) Парциал моляр энтропия силжиш энтропияси

$$\Delta S = -k \ln x_i$$

га ортади, бу ерда x_i – i - таркибловчи билан эгалланган жой улуши.

Биринчи шарт ҳар доим бажарилавермайди, чунки турли хил ўзаро таъсирлар мавжуд. Кейинги иккита шарт бажарилувчи эритмалар регуляр эритмалар дейилади. Нолдан фарқли равишда силжиш энтальпияси мавжуд.

Кўп қаттиқ эритмалар регуляр эритма ҳисобланади, лекин уларни идеалдан оғувчм регуляр эритма деб ҳисоблаш мумкин.

Регуляр эритманинг силжиш энтальпияси одатда квазихимиявий яқинлашишда қидирилади.

“А” ва “В” сортли атомлар аралаштирилатган бўлсин. Ҳар бир сорт атомлар идеал эритма ҳосил қилади. Шунинг учун силжиш энтальпияси фақат янги А ва В қўшимчалар томонидан юзага келган ўзаро таъсирлар улуш қўшади. Баъзан химиявий боғ ўрнатилганлиги ҳақида гапирилади. Бунда уларнинг ўзаро таъсир энтальпияси H_{AB} га

тенг. Силжиш энтальпияси бу боғ ҳосил қилувчи қўшимча энергиянинг боғлар сонига кўпайтмасига тенг.

Кристалл панжаранинг координацион сонини Z билан белгилаймиз. Кристалдаги жойлар сони ва ҳар бир сорт атомлар билан эгалланган жойлар улушини

$$N=N_A+N_B, \quad x_A=N_A/N, \quad x_B=N_B/N. \quad (VI.43)$$

кўринишда аниқлаймиз. Бу атомлар ўз жойларини эгаллаш эҳтимоллигини билдиради. Шунинг учун A атомнинг ўз жойини эгаллаш эҳтимоллиги x_A , B атомники эса x_B бўлади.

Эҳтимолликларни кўпайтириш теоремасига асосан ҳар икки атомнинг бир вақтда ўз жойларини эгаллаш эҳтимоллиги $x_A x_B$. Агар атомлар ўрни алмаштирилса, эҳтимоллик ўзгармайди, Шундай қилиб, қўшни жойларни турли атомлар билан эгалланиш эҳтимоллиги $2x_A x_B$ га тенг.

A - B боғлар сони кристалдаги умумий боғлар йиғиндисига $(ZN/2)$ боғ ҳосил бўлиш эҳтимоллигига кўпайтмасига тенг

$$N_{AB}=2x_A x_B / 2zN_0 = zN x_A x_B \quad (VI.44)$$

У ҳолда A - A , B - B боғлар сони

$$N_{AA}=z(N_A-N_{AB})/2 \quad (VI.45)$$

Кристалнинг тўла энтальпиясини

$$H=N_{AA}H_{AA}+N_{BB}H_{BB}+N_{AB}H_{AB}=zN_A/2H_{AA}+zN_B/2H_{BB}+ \\ +zN x_A x_B [H_{AB}-1/2(H_{AA}+H_{BB})] \quad (VI.46)$$

кўринишда ёзиш мумкин.

Биринчи ва иккинчи ҳадлар аралашувчи таркибловчилар энтальпиясини билдиради. Учинчи ҳад аралашуш энтальпияси

$$H_{CM}=x_A x_B \Omega \quad (VI.47)$$

Бу ерда ўзаро таъсир энергияси

$$\Omega=zN[H_{AB}-1/2(H_{AA}+H_{BB})] \quad (VI.48)$$

Агар

$$H_{AB}=1/2(H_{AA}+H_{BB}) \quad (VI.49)$$

шарт бажарилса, регуляр эритма идеал эритмага айланади.

Ўзаро таъсир характериға қараб силжиш энтальпияси мусбат ёки манфий бўлиши мумкин.

Манфий энтальпия атомлар орасида ўзаро тортишиш мавжудлигини билдиради. Бунинг сабаби унчалик аҳамиятга эга эмас. Силжиш иссиқлигининг мусбат қиймати атомлар орасида итаришиш мавжудлигини билдиради. Тортишиш эритма яқин тартиб ҳосил бўлишига олиб келиши мумкин, бунинг натижасида силжиш энтальпияси ортади.

Эркин Гиббс энергиясини дифференциаллаб, маълум

$$\mu_B = \mu_B^0 + kT \ln x_B + (1 - x_B)^2 \Omega \quad (\text{VI.50})$$

натижани оламиз, бу ерда

$$(1 - x_B)^2 \Omega / kT = \ln \gamma_B \quad (\text{VI.51})$$

γ_B – активация коэффициенти,

x_B – В таркибловчининг фаоллиги

$$\alpha_B = \gamma_B x_B \quad (\text{VI.52})$$

Келтирилган формулалар кристал мувозанатда бўлган мухитда таркибловчиларни тавсифлаш учун ишлатилади. Бунда суяқ фаза бўлса, яқин тартиб назарда тутилади.

Нуқсонлар ҳосил бўлиш жараёнларида регуляр ўзаро таъсир ролини кўриб чиқамиз. Қаралаётган эритмада 2 хил атом борлигини яна бир бор таъкидлаймиз. Улардан бири эритувчи, иккинчиси эрувчи ролини ўйнайди. Улар орасида ўзаро таъсир юзага келади. Бу нуқсон билан кристал матрица орасида ўзаро таъсир бўлишини билдиради. Бундан ташқари регуляр эритмалар учун формулалар чиқаришда элементлар жуда яқин жойлашган ва қисқа ўзаро таъсир юз беради деб ҳисобланган. Бу нуқсон ҳосил бўлишидир. Шунинг учун регуляр ўзаро таъсир энергияси нуқсон ҳосил бўлиш энтальпиясига кириш керак.

Яна бир нарсани ҳисобга олиш керак. Нуқсонлар билан эгалланган жойлар улуши бирдан жуда кичик. Шунинг учун (VI.50) формуладаги учинчи ҳадни ҳисобга олмаслик мумкин. Бу ҳолда нуқсон энтальпияси биринчи яқинлашишда регуляр ўзаро таъсир натижасида доимий қўшимчага эга бўлади.

Шундай қилиб, қаттиқ жисмдаги нуқсонларнинг доимий ўзаро таъсирини ҳисобга олмаслик мумкин. Бу ўзаро таъсирни тавсифловчи параметрлар концентрацияга боғлиқ эмас ва нуқсон ҳосил бўлиш термодинамик параметрлари билан умумлаштирилади.

6.4 Бирикма ҳосил бўлишига олиб келувчи ўзаро таъсир

Маълум шароитларда температура пасайиши билан кристалларда бирикмалар ҳосил бўлиши мумкин. Бирикма – бу ҳусусий физик ҳусусиятларга эга бўлган кристал матрицада квазимолекула кўринишидаги турғун бирикмадир. Бирикма кристал симметриясидан фарқ қилувчи ўз симметриясига эга бўлади, улар кристал панжарада бир неча эквивалент жойларни эгаллаши мумкин.

Физик нуқтаи назардан бирикмани юзага келтирувчи кучлар табиати турлича бўлиши мумкин. Ҳусусан, электромагнит ўзаро таъсир муҳим роль ўйнайди. Ҳар бир бирикма ўз нуқсон ҳосил бўлиш энергиясига эга бўлади.

Бирикма ҳосил бўлиш жараёни химиявий потенциал ва таркибий элементлар эрувчанлигига қандай таъсир қилишини кўриб чиқамиз.

Энг содда бирикма, яъни киришма ва вакансия бирикмасини кўрамиз. Соддалик учун ионизация жараёнларини ҳисобга олмаймиз. Бу ҳолда кристалнинг эркин энергияси қуйидаги кўринишда ёзилиши мумкин

$$G = \mu_{\beta}^{\beta} N_{\beta}^{\beta} + \mu_{\alpha}^{\beta} N_{\alpha}^{\beta} + g_{\nu}^{\beta} N_{\nu}^{\beta} + g_k^{\beta} N_k - kT \ln W \quad (\text{VI.53})$$

бу ерда

$$W = \frac{N_k!}{N_{\beta}^{\beta} (N_{\alpha}^{\beta} - N_k) (N_{\nu}^{\beta} - N_k)! (N_{\alpha}^{\beta} - N_k)! (N_{\nu}^{\beta} - N_k)! N_k!} \quad (\text{VI.54})$$

(VI.54) ни ёзишда эркин таркибий элементларни аралаштириш кераклиги эътиборга олинган. Шунинг учун махраждаги N_{α}^{β} -эркин киришмалар, N_{α} -вакансиялар. N_{α} бўйича ҳосила олиб ва нолга тенглаб, ўхшаш бирикмалар концентрациялари учун маълум ифодани оламиз

$$N_k = ((N_{\alpha}^{\beta} - N_k)(N_{\nu}^{\beta} - N_k)/N_{\beta}^{\beta}) \exp(-g_k/kT) \quad (\text{VI.55})$$

Бирикма ҳосил бўлишида қатнашаётган киришмаларнинг химиявий потенциалини ҳисоблаймиз

$$(\partial G / \partial N_{\alpha}^{\beta})_N = \mu_{\alpha}^{\beta} - kT [\ln N_{\beta}^{\beta} - \ln (N_{\alpha}^{\beta} - N_k)] \quad (\text{VI.56})$$

Бу ердан кўриниб турибдики, бирикма ҳосил бўлиш жараёнлари нуқсоннинг химиявий потенциалига таъсир этади. Бу энг аввало статистик ўзаро таъсир ҳисобига юз беради.

6.5 Қаттиқ жисмдаги нуқсонлар ионизацияси

Нуқсонлар ионизацияси ва бошқа нуқсон ҳосил бўлиш жараёнлари таъсирлашувчи массалар қонуни асосида кўриб чиқилиши мумкин.

Ионлашиш реакциясини ёзамиз:



Мос мувозанат доимийси

$$K_{Be} = [B^{+}] / [B] = \exp(\mu_{B^{+}} + \mu_{e^{-}} - \mu_B / kT) \quad (\text{VI.58})$$

Бу ерда $\mu_{e^{-}}$ Ферми энергияси билан аниқланувчи электроннинг химиявий потенциал, $\mu_{B^{+}}$ - ионлашган атом химиявий потенциал.

Ферми энергиясининг физик маъносига мос ҳолда

$$n = N_e \exp(-\mu_e / kT) \quad (\text{VI.59})$$

Бундан ташқари ионлашган ва ионлашмаган ҳолатлар Ферми сатҳлари фарқи нуқсоннинг ионизация энергиясига тенг. У ҳолда (7.3) ни ҳисобга олинса, (VI.58)

$$K_{Be}=[B^+]n/[B]=N_e \exp(-\varepsilon_B/kT) \quad (VI.60)$$

(VI.60) ҳисоблашларда ишлатилади, аммо у жуда тўғри эмас. Бу ноаниқликларни аниқлаш учун қаттиқ жисмларда квант ўтишлар назариясига мурожат қиламиз.

Электроннинг асосий ҳолатдан уйғонган ҳолатга квант ўтишни электрон-панжара потенциал системасини таҳлил қилмай туриб кўриб чиқиш мумкин эмас. Ўтиш потенциал энергия ўзгариши ёки панжара қутбланиши орқали юз беради. Бундай система Гамильтониани

$$\hat{H}=\hat{H}_e(r)+\hat{H}_{eL}(r,R)+\hat{H}_L(R) \quad (VI.61)$$

бу ерда H - атомлар майдонида электронлар гамильтониани, $\hat{H}_L$ - кристал атомлари эркин тебранишлари гамильтониани, $\hat{H}_{eL}$ - электрон-фонон ўзаро таъсир оператори, r - электронлар координаталари, R - ядролар координаталари.

Адиабатик яқинлашишда тўлқин функция ядро координаталарига кучсиз боғланган деб фараз қилинади. Шунинг учун (VI.61) да ядро координаталари бўйича ҳосилалар ҳисобга олинмайди.

Шунинг учун тўлқин функцияни электрон ва ядро тўлқин функциялари кўпайтмаси шаклида тасаввур қилиш мумкин:

$$\Psi=\Phi_e(r,R)\phi_L(R) \quad (VI.62)$$

Шредингер тенгламаси иккига бўлинади:

$$-\hbar^2/8\pi^2m\S \Delta\Psi_e(r,R)+ V(r,R) \Psi_e(r,R)=W(R) \Psi_e(r,R) \quad (VI.63)$$

$$-\hbar^2/8\pi^2\S M^{-1}_\alpha\Delta_\alpha\Psi_L(R)+ W(R) \Psi_L(R)=E\Psi_L(R) \quad (VI.64)$$

Биринчи тенглама қўзғалмас ядро майдонида электронлар ҳолатини тавсифлайди. Иккинчиси эса ўртачалаштирилган электронлар майдонида ядро ҳаракатини тавсифлайди. Электронлар энергиясининг хусусий қийматлари ядролар потенциал энергияси ҳисобланади ва адиабатик потенциал дейилади.

Кичик тебранишлар яқинлашиши ва нормал координаталарга ўтиш нормал тебраниш модлари бўйича ёйилган адиабатик потенциални олишга имкон беради.

Кейинги ҳисоблашларда тўла тебраниш спектрини ҳисобга олиш мумкин эмас, шунинг учун бир координатали яқинлашишдан фойдаланилади. Бу яқинлашишда системада тўла симметрияли тебраниш модаси билан ўзаро таъсир бош ролни ўйнайди.

Бу яқинлашиш тебраниш характериға қаттиқ шартлар қўяди, хусусан, локал тебранишларнинг бош ролини талаб қилади. Нуқсон яқинида локал ва псевдолокал тебранишлар ҳосил бўлиш шартлари [9, 10] ишларда муҳокама қилинган.

Кристалнинг ички молекуляр тебранишлар частотаси муҳим аҳамиятга эга. Агар ички молекуляр тебранишлар частотаси кристал матрицанинг рухсат этилган частоталар соҳасига тушса, кристалда ички молекуляр тебранишлар энергияси нурланади ва тебранишлар тез сўнади.

Нуксонларнинг заряд алмашиш жараёнида бундай тебранишлар электрон-фонон ўзаро таъсирига сезиларли улуш қўшмайди. Аксинча, молекуляр тебранишлар частотаси рухсат этилган соҳага тушмаса, тебранишлар секин сўнади. Бунда фақат нуксонга яқин атомлар тебраниш жараёнида иштирок этади. Бундай тебраниш локал дейилади, улар ўзаро таъсирда муҳим рол ўйнайди.

Лекин локал тебранишлар частотаси кристалнинг резонанс частотасидан ташқарида жойлашиши керак, шунинг учун бундай тебранишлар энергияси панжаранинг оптик фононлар энергиясидан катта бўлиши керак. Бу шарт ички молекуляр тебранишлар учундоим ҳам бажарилавермайди. Лекин шундай ҳоллар мавжудки, локал модлар рухсат этилган соҳага тушса ҳам асосий панжара билан кучсиз боғланган ёки кристалга хос бўлган тебраниш симметрияси билан бундай тебранишлар псевдолокал дейилади ва муҳим аҳамиятга эга.

Шредингер тенгламасининг бир координатали яқинлашишдаги ечими электрон уйғонган ҳолатга ўтишда потенциал энергияси ортиб, минимум координатлари ўзгаришини кўрсатади. Бу электрон-фонон ўзаро таъсир натижасида уйғонган ҳолатга ўтилганда ядролар асосий ҳолатга нисбатан силжишини тасдиқлайди. Бунда бир координатали моделда потенциал энергия учун

$$E_g = E_1 + \frac{1}{2} \hbar \omega_g Q^2, \quad E_e = E_2 + \frac{1}{2} \hbar \omega_g (Q - Q_0)^2 \quad (\text{VI.65})$$

ечимлар олинадилар, бу ерда E_1 – асосий ҳолат, E_2 – уйғонган ҳолат потенциал энергиялари, $\hbar \omega_g$ – ўзаро таъсирда қатнашаётган фононлар энергияси асосий ва уйғонган ҳолатдаги эффектив частоталар бир-биридан фарқ қилишини билдиради, Q – конфигурацион координата қиймати, Q_0 – уйғонган ҳолат потенциал энергиясининг уйғонган ҳолати.

(VI.65) формулалар гармоник яқинлашишда ёзилган. Улар кесишувчи параболалар кўринишида тасаввур қилинади ва конфигурацион координаталар диаграммаси дейилади.

Таъкидлаш керакки, ангармоник тебранишлар ҳисобга олинганда параболаликдан оғилади. Бундан ташқари резонанс ўзаро таъсир натижасида эгри чизиклар кесишишмайди.

Электроннинг оптик уйғониш жараёнида ўтишида Франк-Кондон принципи амал қилади. Бунда зарранинг асосий ҳолатдан уйғонган ҳолатга ўтишида ядролар силжишга улгуришмайди. Шунинг учун фотонни ютиб ўтувчи нуксон оптик ўтиш диаграммасида вертикал стрелка билан белгиланди. Нурланиш билан ўтиш эса Q_0 нуктада берилган.

Ўтиш ва нурланиш билан ўтишдаги энергиялар

$$h\nu^{\text{ютил}} = E_0 + s\hbar\omega_e; \quad h\nu^{\text{нур}} = E_0 + s\hbar\omega_g \quad (\text{VI.66})$$

кўринишда бўлади, бу ерда ω_g -термолизация жараёнида қанча фотон ажралганлигини кўрсатувчи фактор, E_0 - асосий ва минимал уйғонган энергиялар фарқи, у электрон ўтиш энергияси дейилади.

(VI.66) формуладан келиб чиқувчи содда холда уйғонган ҳолатга ўтилганда фонон энергияси ўзгармайди. $s\hbar\omega$ - система мувозанат ҳолатга ўтишга интилганда ажраладиган энергияни билдиради.

Оптик ютилиш ва нурланиш энергиялари фарқи панжара кутбланиш энергиясини билдиради. У бир неча номларга эга: Франк-Кондон силжиши, Стокс йўқотиш ва иссиқлик ажралиши.

$$h\nu^{\text{погл}} - h\nu^{\text{изл}} = \Delta E = 2s\hbar\omega \quad (\text{VI.67})$$

ΔE - иссиқлик ажралиш каттлиги.

Уйғонган ҳолат энергиясининг минимуми s фактор билан боғланган. Бу боғланишни топиш учун оптик ўтиш энергиясини s ва Q орқали ёзамиз

$$h\nu^{\text{погл}} = E_0 + 1/2 \hbar\omega \quad Q_0^2 = E_0 + \hbar\omega \quad (\text{VI.68})$$

бу ерда

$$Q_0 = \sqrt{2s}; \quad s = 1/2 Q_0^2 \quad (\text{VI.69})$$

Классик нуқтаи назардан асосий ҳолатдан уйғонган ҳолатга нурланишсиз ўтиш потенциал эгри чизиқларнинг кесишиш нуқтаси (C) дан ўтиши керак. Фононларни ютиб система аввал O нуқтадан C нуқтага, кейин уйғонган ҳолатга ўтади.

Конфигурацион координаталар модели нуқтаи назаридан термик эмиссия юз беради. Бу ҳолда термик активлашиш энергияси қиймати электрон ўтиш энергияси орқали ифодаланади, иссиқлик ажралиши эса (7.9) дан олинadиган ифода орқали аниқланади. Аввал конфигурацион координатани топамиз

$$E_g = E_e = E_{xt} + 1/2 \hbar\omega \quad Q_x^2 = E_0 + 1/2 \hbar\omega (Q_x - \sqrt{2s})^2 \quad (\text{VI.70})$$

Бу ердан

$$Q_x = E_0 + \hbar\omega / \sqrt{2s} - s\hbar\omega \quad (\text{VI.71})$$

Классик термик ўтиш энергияси

$$E_x = 1/2 \hbar\omega \quad Q_x^2 = (E_0 + s\hbar\omega)^2 / 4s\hbar\omega \quad (\text{VI.72})$$

В нуқтадан O нуқтага тескари ўтиш ҳам C нуқта орқали юз бериши керак. Бу ўтиш электроннинг марказда ушланишини билдиради. Равшанки, ушланиш ионизация энергиясига эга

$$E_B = (E_0 - s\hbar\omega)^2 / 4s\hbar\omega \quad (\text{VI.73})$$

Классик нуқтаи назардан А нуқтадан В нуқтага ўтиш тақиқланган, чунки катта массали ядроларнинг туннелланиш эҳтимоллиги жуда кичик. Амалда бундай ўтишлар паст температураларда юз беради. Ўтиш нуқтасининг ўзгариши ушлаш коэффициентининг температурага боғлиқлигига олиб келади, буни амалда кузатиш мумкин. Ўтиш энергиясини энг содда ҳолда, яъни электрон фақат бир хил типли фононлар билан таъсирлашади деб олинди. Лекин бунинг эҳтимоллиги кам ва марказнинг махсус моделларини ишлаб чиқиш керак. Бундан ташқари (VI.71), (VI.72) формулалар эришиш қийин бўлган температуралардагина тўғри. Шунинг учун уларни электрон-фонон ўзаро таъсирни ҳисоблашда ишлатиш мақсадга мувофиқ эмас.

Ҳақиқатан, экспериментлар 400 К дан паст температураларда ўтказилади. Сигим спектроскопияга асосланган экспериментлар хона температурасидан пастда ўтказилади. Кичик киришмалар активация энергиясини аниқлашнинг температура диапазони азот қайнаш температураси ва ундан пастдир. Бу ҳолда панжара киришма ионизациясида асосан классик эмас, балки А дан В га туннель усули билан ўтилади.

Кузатиш мумкин бўлган температураларда нуқсон ҳосил бўлиш жараёнларининг температура диапазони 600 К дан бошланади. Бу система уйғонган ҳолатга классик усулда ўтганда ва (VI.71), (VI.72) формулалар ўринли бўлганда етарли.

Шундай қилиб, паст температураларда аниқланган активация энергиясининг қийматлари электрон-фонон ўзаро таъсир муҳим аҳамиятга эга бўлганлиги учун юқори температура нуқсон ҳосил бўлиш жараёнларида ишлатилмайди.

Конфигурацион диаграмма электрон, термик, оптик ютиб ва нурланиб ўтиш энергиялари фарқини кўрсатади, унинг ёрдамида Стокс ўтишининг сифат талқини ва ушлаш коэффициентларининг актив боғланишларини олиш мумкин.

Шунингдек, қоронғи ва ёруғликдаги фотохимик реакциялар мувозанат доимийлари билан фарқ қилади ва ионизацияни келтириб чиқарувчи ёруғлик оқимининг спектрал таркибига боғлиқ.

Конфигурацион координаталар модели спектрал чизиқларнинг кенгайишини тушунтириб беради. Ҳақиқатан, фақат О нуқтада эмас, балки ихтиёрий нуқталарда ютилиш бўлиши мумкин, чунки система бир неча фононни ютиши ёки чиқариши мумкин. Бунда ютилаётган ёруғлик энергияси ўзгаради ва бир нечта фотон ютилиш эҳтимоллиги кам бўлганлиги учун О нуқтадан бошқа нуқталардан ўтиш интенсивлиги кам.

Шундай қилиб, спектрал чизиқлар электрон-фонон ўзаро таъсир параметрлари ҳақида максимумга эга бўлган қўнғироқсимон полосага кенгайди. Бу полоса шаклини ўрганиш электрон-фонон ўзаро таъсир параметрларини экспериментал қийматларини олишга ва уларни келгусида ишлатишга имкон беради.

Яна бир қайд. Термик эмиссия заряд ташувчиларни локал ҳолатдан эркин ҳолатга ўтказди, яъни боғланган ҳолатдан электронлар ўтказувчанлик зонасига, коваллар валент зонага ўтади. Шунган асосан яримўтказгичларга бағишланган ишларда асосий ва уйғонган ҳолатлар зона потенциали билан боғланилади. Лекин конфигурацион координаталар модели ички марказий ўтишлар учун ишлаб чиқилган. Потенциал эгри чизиқлар – бу электрон асосий ва уйғонган ҳолатда бўлганда чуқур сатҳ ҳосил қилувчи нуқсон панжара энергияси боғланган ҳолатдан уйғонган ҳолатга ўтиш ҳисобга олинмайди. Бу ҳолдаги нурланишсиз тутиб олиш кўп фононли ўтиш механизмини ёки нуқсондан панжарага энергия берилиш усулини тушунтириб беради.

Бундай ўтиш учун электрон чуқур сатҳ ҳосил қилувчи нуқсон яқинида ушланиши керак. Шунинг учун конфигурацион координаталар диаграммаси зона потенциалларини тасвирламайди. Бу ҳолатлар энергияси ўтказувчанлик зонасининг шипи билан мос тушади.

Нуқсон ионизацияси панжарани уйғонган ҳолатга ўтказди. У кутбланади. Электрон-тебраниш ўтишда катнашувчи фонон эффектив частотаси нуқсон ионизациясида ва панжаранинг уйғонган ҳолатга ўтишида ўзгариши мумкин. Баъзи ҳолларда буни экспериментал аниқлаш мумкин.

Айтилганлардан нуқсон ионизацияси реакцияси мувозанат доимийсига кировчи катталикларни аниқлаш учун қатъий назария керак эканлиги келиб чиқади. Нуқсон ҳосил бўлиш жараёнлари учун адиабатик яқинлашиш ўринли эмас ва бошқа методлар ишлаб чиқилган.

Назорат саволлари

1. Кристаллардаги киришма атомларининг ўзаро ички таъсирлашуви турлари ва оқибатлари?
2. Парциал эркин энергия таърифи?
3. Идеал эритмалар ҳосил қилиш шартлари?
4. Ферми энергиясининг физик маъноси?
5. Локал тебранишлар таърифи?

ТЕСТ

1. Диффузия ходисаси нимани англатади?

- A) Модда алмашуви;
- B) Атомларнинг ўзаро киришуви;
- C) Бир модда атомларини иккинчи модда атомларига кириши.
- D) Сукулма атомларнинг ҳосил бўлишини

2. Кристалнинг оддий ячейкаси ?

- A) Кристални энг кичик бўлаги;
- B) Кристални барча хусусиятларини сақлаб қолувчи энг кичик бўлак;
- C) Кристалл атомлари жойлашиши тузилмаси.
- D) Кристални энг катта бўлаги;

3. Панжара доимийси?

- A) Панжара атомлари орасидаги масофа;
- B) Панжарадаги икки қўшни атом орасидаги масофа;
- C) Панжаралар орасидаги масофа.
- D) Панжаранинг энг боши билан энг охири орасидаги масофа;

4. Кристалларда нечта сингония мавжуд?

- A) 16;
- B) 7;
- C) 11.
- D) 20

5. Кристалл панжаралари турлари нечта?

- A) 16;
- B) 7;
- C) 11.
- D) 20

6. Миллер индекслари нима?

- A) Панжара томонлари тузилмалари;
- B) Панжара атомлари орасидаги масофалар;

С) Панжара ўқларининг координата ўқларидаги кесимларини умумий маҳражга келтириб, маҳражларини ташлаб юборилгандаги сон қийматлари.

Д) Панжарадаги икки қўшни атом орасидаги масофа;

7. Кристаллардаги хусусий нуқсонлар?

А) Силжиган атомлар;

В) Дислокациялар;

С) Реал кристаллардаги идеал кристалдан четлашишлар.

Д) Панжара атомларининг силжиши;

8. Нуқтавий нуқсонлар?

А) Кислород, углерод;

В) Вакансия, Киришма атомлар;

С) Ўлчамлари атом ўлчамлари тартибида бўлган барча нуқсонлар.

Д) барчаси тўғри

9. Нуқсонлар қайси ҳолатда температурага боғлиқ?

А) $N = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{KT}\right);$

В) $N = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta E - F}{KT}\right);$

С) $N = N_0 \exp(-\Delta E / 2KT);$

Д) барча ҳолатларда

10. Кристалларда чизигий нуқсонлар?

А) Ҳар қандай чўзинчоқ нуқсонлар;

В) Дислокация, бўлиниш чегаралари, ёриқлар;

С) Кристални қирралари, фазовий бўлиниш чегаралари.

Д) Вакансия, кластер, Киришма атомлар

11. Диффузия учун Фик нинг I–тенгламаси?

А) $j = -D \frac{dN}{dx};$

В) $D = q \frac{\mu}{KT};$

С) $\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}.$

Д) $j = \frac{dN}{dx};$

12. Фик нинг 2–қонуни?

A) $j = -D \frac{dN}{dx}$;

B) $D = q \frac{\mu}{KT}$;

C) $\frac{\partial N}{\partial t} = D \frac{\partial^2 N}{\partial x^2}$.

D) $j = -D \frac{dN}{dx}$;

13. Диффузия коэффициентининг температурага боғлиқлиги?

A) $D = D_0 \exp(-E / KT)$;

B) $\ln D = \ln D_0 - E / KT$;

C) A ва B.

D) $D = D_0(E / KT)$;

14. Диффузия механизмлари?

A) Тугунлараро;

B) Вакансиялар бўйича;

C) Тугунлараро, вакансиялар бўйича, диссоцияси

D) Ионланиши

15. Атомларнинг “секин” диффузияланишига сабаб?

A) Атомларнинг ўлчамлари катта;

B) Ионланиши қийин;

C) Ўлчамлари ва электрон қобиғи асосий атомларникига ўхшаш.

D) Вакансиялар

16. Атомларнинг “Тез” диффузияланишига сабаб?

A) Атомларнинг ўлчамлари кичик;

B) Ионланганда ўлчамлари кичик;

C) Атомларнинг ўлчамлари асосий атомлариникидан катта фарқ қилади.

D) Вакансиялар

17. Компенсирланган яримўтказгич?

A) Катта қаршиликли яримўтказгич;

B) Икки хил киришма билан легирланган яримўтказгич;

C) Бир –бирига яқин миқдордаги донор ва акцептор киришма атомлари билан легирланган ярим ўтказгич

D) Вакансиялари кўп бўлган яримўтказгич

18. Тўла компенсирланган яримўтказгичда... ?

- A) $K > 1$;
- B) $K < 1$;
- C) $K \approx 1$.
- D) $K \gg 1$;

19. Донорли киришма?

- A) Электрон берувчи;
- B) Электрон олувчи;
- C) Иккаласи ҳам.
- D) Катта қаршиликли яримўтказгич;

20. Акцепторли киришма?

- A) Электрон олувчи;
- B) Электрон берувчи;
- C) Иккаласи ҳам тўғри.
- D) Кичик қаршиликли яримўтказгич;

21. Кристалларда бирикмалар?

- A) $V - 0$, $V - P$;
- B) W ; V -киришма атом
- C) Киришма атомлар ва кристалл нуксонларнинг ўзаро таъсирлашуви натижаси
- D) $V - P$, $V - P$

22. Ионларни “эргаштириб кетиш” ходисаси сабаби?

- A) Кулон кучлари;
- B) Ўзаро таъсирлашув;
- C) Электронлар “булути”.
- D) Ньютон кучлари;

23. Диффузия учун Эйнштейн тенгламаси?

- A) $\frac{D}{D_0} = e^{-\frac{Q}{KT}}$.
- B) $\frac{D}{q} = \frac{\mu}{KT}$.
- C) $\frac{dN}{dt} = +D \frac{\partial N^2}{\partial x^2}$.
- D) $\frac{D}{D_0} = \frac{Q}{KT}$.

24. Кристалл сиртининг тузилиши?

- A) Узилган боғланишлар;

- B) Атомлар етишмовчилиги;
- C) Юпқа оксид қатлами.
- D) Вакансиялар

25. Диссоциатив диффузия нима?

- A) Вакансиялар бўйича;
- B) Тугунлараро;
- C) Иккаласи аралаш бўлган хол.
- D) Тугунлар

26. p ва n ўтиш?

- A) Металл –яримўтказгич контакти;
- B) p ва n типли яримўтказгич контакти;
- C) Ҳаммаси тўғри.
- D) p – n типли яримўтказгичларни бир бирига текказилиши ;

27. Диффузиянинг “ҳаракатлантирувчи ” кучлари?

- A) Температура;
- B) Атомларининг ўзаро таъсирлашуви;
- C) Температура ёки атомлар концентрацияси градиенти.
- D) Электр токининг камайиши

28. Нуқсонларнинг диффузияга таъсири?

- A) Тезлатади;
- B) Секинлатади;
- C) Таъсир қилмайди.
- D) Жуда ҳам секинлатади

29. Бирикмалар ҳосил бўлишининг атомларга таъсири?

- A) Секинлатади;
- B) Тезлатади;
- C) Таъсир қилмайди.
- D) Жуда ҳам тезлатади

30. Диффузияни фаоллашиш энергияси?

- A) Атомларни ҳаракатлантирувчи энергия;
- B) Атомларни ионланиш энергияси;
- C) Атомларни диффузияланиши учун зарурий энг кичик энергия.
- D) Электронларнинг атомлардан узилиб чиқиши

31. Диффузиянинг экспонент олди коэффиценти?

- A) Доимий сон;

- В) Диффузия коэффициентининг энг катта қиймати
- С) $T \rightarrow \infty$ даги D нинг қиймати
- Д) $T \rightarrow 0$ даги D нинг қиймати

32. Яримўтказгичдаги энергия соҳалари?

- А) Электрон ва коваклар мавжудлик соҳалари;
- В) Электрон ва коваклар энергиялари;
- С) Кристалдаги электрон ва коваклар энергетик сатхларининг йиғиндилари.
- Д) Ферми сатҳи

33. Яримўтказгичнинг тақиқланган соҳасида бўлиши мумкин бўлган энергетик сатхлар?

- А) Донорли.
- В) Акцепторли.
- С) Донорли, акцепторли
- Д) Вакансиялар

34. Диффузия температурасида тобланган яримўтказгичнинг термодинамик холати?

- А) Мувозанатда;
- В) Номувозанатий;
- С) Иккала ҳолат ҳам мавжуд.
- Д) $T \rightarrow \infty$ даги D нинг қиймати

35. Тоблаш усулида олинган яримўтказгичга кейинги термик илошлов берилганда комперсирланганлик даражаси?

- А) Ортади;
- В) Камаяди;
- С) Иккала ҳол ҳам бўлиши мумкин.
- Д) Ўзгармайди

36. Кремнийнинг 300 К да тақиқланган соҳаси кенглиги?

- А) 0,7 эВ;
- В) 1,12 эВ;
- С) 2,2 эВ
- Д) 0,5 эВ

37. Германийнинг 300 К да тақиқланган соҳаси кенглиги?

- А) 0,7 эВ;
- В) 1,12 эВ;
- С) 2,2 эВ.

D) 0,5 эВ

38. n- Si га никель киришмаси киритилса унинг электрон токига ($N_{\alpha} < N_{Ni}$) қаршилиги?

A) Ортади;

B) Камаяди;

C) Ўзгармайди.

D) Секин камаяди

39. p-Ge га темир киришмаси киритилганда унинг ($N_{\alpha} < N_{Ni}$) қаршилиги?

A) Ортади;

B) Камаяди;

C) Ўзгармайди.

D) Секин камаяди

40. p- Si га кобальт киришмаси киритилса унинг ($N_{\alpha} < N_{Ni}$) қаршилиги?

A) Ортади;

B) Камаяди;

C) Ўзгармайди.

D) Секин ортади

41. n- Ge га сурма киритилганда унинг ($N_{\alpha} < N_{Ni}$) қаршилиги?

A) Ортади;

B) Камаяди;

C) Ўзгармайди.

D) Ортиши ҳам, камайиши ҳам мумкин

42. Металларни қиздирилганда унинг электр қаршилиги?

A) Ортади;

B) Камаяди;

C) Ўзгармайди.

D) Ортиши ҳам, камайиши ҳам мумкин

43. Яримўтказгичларни қиздирилганда унинг электр қаршилиги?

A) Ортади;

B) Камаяди;

C) Ўзгармайди.

D) Ортиши ҳам, камайиши ҳам мумкин

44. Металл, яримўтказгич, диэлектрик материаллари таъқиқланган соҳалари катталиги нисбатлари?

A) $E_{\sigma}^M < E_{\sigma}^Y < E_{\sigma}^D$

B) $E_{\phi}^{\text{Я}} < E_{\phi}^{\text{М}} < E_{\phi}^{\text{Д}}$

C) $E_{\phi}^{\text{М}} < E_{\phi}^{\text{Д}} < E_{\phi}^{\text{Я}}$

D) $E_{\phi}^{\text{М}} < E_{\phi}^{\circ} < E_{\phi}^{\text{Я}}$

45. Диффузия ёрдамида р-п ўтиш ҳосил қилишда модданинг бир қисмида?

- A) Ўтказувчанлик тури ўзгаради
- B) Қаршилиги ўзгаради.
- C) Иккала ҳолат ҳам тўғри.
- D) Сигими ўзгаради

46. Яримўтказгичларда киришма атомларни киритиб:

- A) Юпқа қатламларни хусусиятларини бошқаришади.
- B) Кристаллани структураси ўзгартирилади.
- C) Қотишмалар ҳосил қилинади.
- D) Киришмалар ҳосил қилинади

47. Диффузиянинг илмий аҳамияти бу –

- A) Кристалларда атомлар ҳаракатини ўрганиш.
- B) Кристалладаги атомларнинг ўзаро таъсирлашувини ўрганиш.
- C) Иккаласи ҳам тўғри.
- D) Киришмаларни ўрганиш

48. Ҳаракатчанлик бу –

- A) Заррачалар тезлиги.
- B) Атомлар билан тўқнашиш тезлиги.
- C) Ток ташувчиларни бирлик юзадан ўтиш тезлиги
- D) Заррачалар тезланиши

49. Ионларнинг “Эффектив заряди”?

- A) Атомдаги етишмаётган мусбат ёки манфий заряд.
- B) Қарама – қарши зарядли ионларнинг тортишиш қобилияти.
- C) Кристалларда тажриба ҳолатида заррачани кузатиладиган заряди.
- D) Кристалларда назарий ўрганиладиган заряди.

50. Атомларда электронларнинг энергетик спектри?

- A) Электронларнинг айланиш орбитаси.
- B) Электронларнинг ўзаро таъсирлашув энергияси.
- C) Электронларнинг ядродан узоқлигининг энергетик меъёри.
- D) Электронларнинг кинетик энергияси

51. Яримўтказгичларда тақиқланган соҳа?

- A) Электронлари бўлмаган соҳа.
- B) Электронларни ядрога боғланиш соҳаси.
- C) Электронларни ковак билан тўқнашиш соҳаси
- D) Барчаси тўғри

52. Ўтказувчанлик соҳаси?

- A) Электр токини ўтказувчи соҳа.
- B) Рекомбинация соҳаси.
- C) Электронларни ядро тортиши кучидан озод бўлган энергетик соҳа.
- D) Барчаси тўғри

53. Валент соҳаси?

- A) Эркин электронлар соҳаси.
- B) Боғланган электронлар соҳаси.
- C) Атомларни валент электронлари соҳаси.
- D) Ўтказувчанлик соҳаси

54. Киришма атомлар энергетик сатҳлари?

- A) Атомларнинг кристалдаги ўрни.
- B) Атомларнинг кристалдаги ионланиш энергияси.
- C) Браве панжаралари сони
- D) Боғланган электронлар соҳаси

55. Кубик панжаралар сони?

- A) 1
- B) 3
- C) 7
- D) 4

56. Браве панжаралар сони?

- A) 7
- B) 14
- C) 71.
- D) 35

57. Ромбик панжаралар сони?

- A) 4
- B) 3
- C) 5
- D) 7

58. Моноклик панжаралар сони?

- A) 1
- B) 2
- C) 4
- D) 6

59. Триклин панжаралар сони?

- A) 1
- B) 2
- C) 3
- D) 4

60. Тригонал панжаралар сони?

- A) 2
- B) 1
- C) 5
- D) 7

61. Тетрогонал панжаралар сони?

- A) 1
- B) 2
- C) 4
- D) 8

62. Гексогонал панжаралар сони?

- A) 3
- B) 7
- C) 1
- D) 4

63. Кристалларда боғланиш турлари сони?

- A) 3
- B) 5
- C) 7
- D) 9

64. Кристалларда боғланиш энергияси?

- A) Атомларнинг ўзаро тортишиш энергияси
- B) Алохида атом потенциал энергиясидан шу атомнинг кристалдаги потенциал энергияси айирмаси;
- C) Атомларнинг бир – бирдан итарилиш энергияси
- D) Атомларнинг бир – бирига нисбатан ҳаракатланиш энергияси.

65. Вакансия?

- A) Атомнинг кристалдаги бўш ўрни
- B) Электронни бўш ўрни.
- C) Атомлар учун ажратилган жой.
- D) Ковакни бўш ўрни.

66. Тугун?

- A) Кристалл панжара қирраларининг тасаввурдаги кесишиш нуқтаси.
- B) Кристалл панжарада атомлар турган жой.
- C) Кристалда атомлар тўқнашув жойи.
- D) Барчаси тўғри

67. Тугунлараро бўшлиқ?

- A) Кристалл панжара хажми.
- B) Зич жойлашган атомлар орасидаги бўшлиқ.
- C) Кристалл панжара тугунлари орасидаги бўшлиқ.
- D) Кристал хажми

68. Бирикмалар?

- A) Кристалда атомларнинг қўшимчаси.
- B) Кристалда турли хил атомлар бирлашмаси.
- C) Кристалладаги икки ва ундан ортиқ нуқсонлар ва атомларнинг фаол бирикмалари.
- D) Вакансия ва электрон бирикмаси

69. Кластерлар?

- A) 2-3 атомлар бирикмаси.
- B) Кўплаб атомлар бирикмаси.
- C) 4 – 10 атомлар бирикмаси
- D) Якка атом

70. Электр ўтказувчанлик?

- A) Моддаларда заряд кўчиши
- B) Ток ташувчиларнинг тартибли ҳаракати.
- C) Моддаларда ташқи майдон таъсирида зарядларнинг тартибли ҳаракати.
- D) Ҳаммаси тўғри

71. Яримўтказгич бу...

- A) Яримметалл – яримдиэлектрик модда.
- B) Электр ўтказувчанлиги ташқи таъсирлар ёрдамида бошқарилиши мумкин бўлган модда.
- C) Электр ўтказувчанлиги ўрта бўлган қаттиқ жисм.

D) Электр ўтказувчанлиги ўрта бўлган модда.

72. Кремнийда атомларнинг ўзаро боғланиш тури?

A) Металл.

B) Ковалент.

C) Ион.

D) атомли

73. Кремнийда кристалл панжара доимийси A^0 ?

A) 5,654

B) 5,43

C) 5,56

D) 5,73

74. Германийда электронлар дрейф ҳаракатчанлиги $\text{см}^2/\text{В.с}$?

A) 3900

B) 1500

C) 8500

D) 5400

75. Хусусий германийнинг электр ўтказувчанлиги қанча?

A) $2,1 \cdot 10^{-2}$

B) $4 \cdot 10^{-5}$

C) $5 \cdot 10^{-8}$

D) $8 \cdot 10^{-5}$

76. Кремнийнинг кристалл панжараси тури қандай?

A) Ёнлари марказлашган кубик.

B) Асослари марказлашган ромбик.

C) Тригонал

D) Гексогонал

77. Киришма атомларнинг кристалларда эрувчанлиги нима?

A) Киришма атомларнинг моддага кириши мумкин бўлган миқдори.

B) Киришма атомларнинг моддадаги миқдори.

C) Киришма атомларнинг маълум боғланишлар билан кристалл панжарасида жойлашган миқдори.

D) Киришма атомларнинг моддадаги диффузияси.

Тест жавоблари

1-С, 2-В, 3-В, 4-В, 5-А, 6-С, 7-С, 8-Д, 9-Д, 10-В, 11-А, 12-С, 13-С, 14-С, 15-С, 16-С, 17-С, 18-С, 19-А, 20-А, 21-С, 22-С, 23-В, 24-С, 25-С, 26-С, 27-С, 28-А, 29-А, 30-С, 31-С,

32-A, 33-B, 35-C, 36-B, 37-A, 39-A, 40-B, 41-B, 42-A, 43-B, 44-A, 45-A, 46-A, 47-C, 48-C, 49-C, 50-C, 51-B, 52-C, 53-C, 54-B, 55-B, 56-B, 57-A, 58-B, 59-A, 60-B, 61-B, 62-C, 63-B, 64-B, 65-A, 66-B, 67-C, 68-C, 69-C, 70-C, 71-B, 72-B, 73-B, 74-B, 75-A, 76-A, 77-C.

Мустақил ечиш учун масалалар

1. Таркибида $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ концентрацияли киришмаси бўлган германий учун 300°K температурада тақиқланган зона ўртасига нисбатан Ферми сатҳи аниқлансин. (*Жавоб:* $F=0,196 \text{ эВ}$).
2. Таркибида 10^{17} см^{-3} концентрацияли сурма атомлари ва $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ концентрацияли индий атомлари бўлган германийда 300°K температурада ўтказувчанлик зонаси тубига нисбатан Ферми сатҳи аниқлансин. (*Жавоб:* $F= -0,16 \text{ эВ}$).
3. Агар $m_p^* = 0,4m_e$ бўлса, ҳона температурасида p-типли кремний кристаллида акцепторларнинг қандай концентрациясида Ферми сатҳи валент зона шипи билан мос келади? (*Жавоб:* $N_a=6,33 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$).
4. Донорлар концентрацияси $N_d=2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, акцепторлар концентрацияси $N_a=3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ бўлган германийнинг 300°K температурада электронлар ва коваклар концентрациялари аниқлансин. (*Жавоб:* $n_p=6,25 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $p_p=10^{14} \text{ см}^{-3}$).
5. Қотишма усулида олинган германийли диодда $N_d=10^3 N_a$, ҳар бир акцептор атомга 10^8 та германий атоми мос келади. Хона температурасида потенциал тўсиқ баландлигини топинг. (*Жавоб:* $\phi=0,33 \text{ В}$).
6. 285°K температурада яримўтказгичли диодда $p_p=10^{17} \text{ см}^{-3}$, $p_n=10^{11} \text{ см}^{-3}$ ва p-n ўтиш қалинлиги $\Delta=10^{-4} \text{ см}$, $D_p=49 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, p-n ўтишдаги коваклар концентрацияси чизиқли қонунга бўйсунди деб ҳисоблаб, ковакларнинг диффузия токи зичлиги аниқлансин. (*Жавоб:* $J_p=8300 \text{ А/см}^2$).
7. Бир жинсли ва бир ўлчамли n-типли яримўтказгичда ёруғлик зонди ёрдамида заряд ташувчилар жуфтлари ҳосил қилинмоқда. Агар зонддан 2 мм масофадаги номувозанатли заряд ташувчилар концентрацияси 10^{14} см^{-3} , 4,3 мм масофада эса 10^{13} см^{-3} бўлса, ковакларнинг диффузия узунлиги аниқлансин. (*Жавоб:* $L_p=1 \text{ мм}$).
8. Агар ёруғлик квантлари зичлиги $J=6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}/\text{с}$, квант чиқиши $\eta=1$, сиртий рекомбинация тезлиги 500 см/с , ковакларнинг яшаш вақти $\tau_p=10^{-4} \text{ с}$, диффузия узунлиги $D_p=49 \text{ см}^2/\text{с}$ бўлса, кучли ёруғлик ютадиган n-типли қалин германий наъмунасининг ёритилаётган сиртдаги номувозанатли коваклар концентрацияси аниқлансин. (*Жавоб:* $\Delta p(0)=0,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$).

9. 300°K температурада хусусий германийнинг солиштира қаршилиги аниқлансин. Агар бу наъмунага ҳар бир донор атомига 10^8 та германий атоми мсо келадиган қилиб қўйилса, солиштира қаршилик қандай бўлади? (*Жавоб:* $\rho_1=43,2 \text{ Ом}\cdot\text{см}$, $\rho_2=3,64 \text{ Ом}\cdot\text{см}$).
10. Германий таркибида $2\cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ концентрацияли фосфор атомлари бор. Ўтказувчанлик типи карама-қаршисига ўзгариши ва солиштира қаршилик 0,6 Ом·см га тенг бўлиб қолиши учун наъмунага қандай концентрацияли галлий атомлари қўшиш керак? (*Жавоб:* $N_a=5,7\cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$).
11. Агар донорлар концентрацияси $N_d=2\cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ бўлса, n-типли кремнийнинг 300° K температурада солиштира қаршилиги аниқлансин? (*Жавоб:* $\rho=44,7 \text{ Ом}\cdot\text{см}$).
12. 300°K температурада германийнинг солиштира ўтказувчанлиги 1 мсим/см бўлиши учун қандай концентрацияли акцептор атомлари қўшиш керак? Бунда акцептор атомлари концентрациясининг германий атомлари концентрациясига нисбати нимага тенг? (*Жавоб:* $n=3,29\cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$).
13. Хусусий германий кристалининг температураси 300°K. Агар температура 1% га ортса, ўтказувчанлик неча фоизга ортади? (*Жавоб:* $\sigma_1/\sigma_2= 18\%$)
14. Қандай температурада кремнийдаги хусусий заряд ташувчилар концентрацияси 300°K температурали германийдаги хусусий заряд ташувчилар концентрациясига тенг бўлади? (*Жавоб:* $T_2=1430 \text{ °K}$).
15. Солиштира қаршилиги 5 Ом·см бўлган n-типли германий кристалидан зичлиги 0,1 А/см² бўлган ток оқмоқда. Қанча вақтда электронлар $5\cdot 10^{-3} \text{ см}$ масофани босиб ўтади? (*Жавоб:* $t=2,56 \text{ мкс}$).
16. Солиштира қаршилиги 5 Ом·см бўлган p-типли кремний кристалидан зичлиги 10 мА/см² бўлган ток оқмоқда. Электронлар ва ковакларнинг ўртача дрейф тезликлари аниқлансин. (*Жавоб:* $v_n=25 \text{ см/с}$, $v_p=70 \text{ см/с}$).
17. 20°С температурада ўлчамлари 0,25х0,25х0,05 см бўлган яримўтказгич наъмунада заряд ташувчилар концентрацияси 10^{15} см^{-3} бўлиб, унинг юпқа томонларига 20 В кучланиш қўйилган. Агар ҳаракатчанли 500 см²/В·с бўлса, ток кучи аниқлансин. (*Жавоб:* $J=0,8 \text{ мА}$).
18. Заряд ташувчиларнинг диффузия коэффиценти $D_n=10^{-2} \text{ м}^2/\text{с}$, яшаш вақти $\tau=10^{-4} \text{ с}$ бўлса ва наъмунада $E=10^4 \text{ В/м}$ электр майдон ҳосил қилинса, диффузия ва дрейф узунликлари нисбати аниқлансин? $T=300^\circ\text{K}$. (*Жавоб:* $L_n/L_E=2,6\cdot 10^{-3}$).
19. Агар ковакларнинг диффузия узунлиги 0,7 мм бўлса, кучланганлиги 5 В/м бўлган электр майдонида ҳона температурасидаги n-типли германийдаги ковакларнинг дрейф узунлиги аниқлансин. (*Жавоб:* $L_E=0,95 \text{ см}$).

20. Кремний монокростилида 300°K температуради $\mu_n=1400 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, $\mu_p=500 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ бўлса, диффузия коэффициентлари аниқлансин. (*Жавоб:* $D_n=36,1 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, $D_p=12,9 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$).
21. n-типли германий кристилида $\mu_n=3900 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, заряд ташувчиларнинг яшаш вақти 100 мкс бўлса, 300°K температурада электронларнинг диффузия узунлиги аниқлансин. (*Жавоб:* $L_p=1 \text{ мм}$).
22. 300°K температурада солиштирма қаршилиги 2 Ом·см бўлган n-типли кремний наъмунада асосий бўлмаган заряд ташувчиларнинг яшаш вақти 5 мкс. Юзалардан бирида коваклар концентрацияси доимий (10^{13} см^{-3}) ушлаб турилибди. Диффузион ток аниқлансин. (*Жавоб:* $j_n=2,6 \text{ мА}/\text{см}^2$).
23. Агар кремний наъмунадаги заряд ташувчиларнинг диффузия коэффициенти $5\cdot 10^{-2} \text{ м}^2\cdot\text{с}^{-1}$, диффузия узунликлари 5 мм бўлса, уларнинг ўртача яшаш вақти аниқлансин. (*Жавоб:* $\tau_n=0,5 \text{ мс}$).
24. Паст температурали оптик тебранишларда яримўтказгичларнинг температураси 2 марта ортса, заряд ташувчиларнинг ҳаракатчанлиги қандай ўзгаради? (*Жавоб:* $\mu_2/\mu_1=0,7$).
25. 5 мВ кучланиш берилганда 3 пФ сифимга эга бўладиган p-n ўтиш ҳосил қилаётган кремнийдаги донорлар концентрацияси $2\cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, акцепторлар концентрацияси эса $6\cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ бўлса, p-n ўтишдаги потенциаллар фарқи аниқлансин. (*Жавоб:* $\varphi_{p-n}=6,01 \text{ мВ}$).

Фойдаланилган адабиётлар

1. Б.И.Больтакс. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках (Москва, Наука, 1972).
2. С.Зайнабидинов. Физические основы образования глубоких уровней в кремнии (Ташкент, Фан, 1984).
3. Ч.Киттель. Введение в физику твердого тела, М., Физматгиз, 1993.
4. Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков. Технология полупроводниковых и диэлектрических материалов. Москва, «Высшая школа».1990
5. А.Я. Нашельский. Производство полупроводниковых материалов. Москва, «Металлургия», 1982
6. С. Зайнабидинов, А. Тешабоев. Яримўтказгичлар физикаси. Тошкент, «Ўқитувчи»,1999
7. А.Тешабоев, С. Зайнобидинов, Ш. Эрматов. Қаттиқ жисм физикаси. Тошкент, «Молия»,2001
8. А.Тешабоев ва бошқалар. Яримўтказгичли асбоблар физикаси. Андижон, «Хаёт».2002
9. В.И.Фистуль. Физика и химия твердого тела. Москва , “Металлургия», часть 1,2, 1995
10. А.Малышева. Технология производства интегральных микросхем. «Радио и связь»,1991
11. И.Г.Пичугин, Ю.М.Таиров. Технология полупроводниковых приборов. М., “Высшая школа”,1984
12. М.Г.Мильвидский. Полупроводниковые материалы в современной электронике. Москва, «Наука»,1986

13. С.Зайнобидинов, А.Тешабоев, С.Власов, И.Каримов, В.Абдуазимов
“Яримўтказгичлар сирт физикаси”.
14. Дж. Маннинг “Кинетика диффузии атомов в кристаллах”. М.Мир
15. Н.Г.Б.Абдуллаев, ГД.Джафаров. Атомная диффузия в полупровод-никовых
структурах. М.Атом миздат, 1980
16. Я.Е.Гегузин. Диффузионная зона. М.Наука 1979
17. Б.С.Бонштейн. Диффузия в металлах. М.Металлургия 1979
18. Г.Д.Дмадоров. Дректи диффузия в эпитиксмальных структурах. Л.Наука 1978
18. Б.И.Богтакс. Диффузия в полиипроводниновых. М.Ф.М 1961

Кириш

1-боб. Яримўтказгич кристаллардаги нуқсонлар

- 1.1. Нуқсонлар турлари
- 1.2. Термодинамик мувозанатдаги нуқтавий нуқсонлар
- 1.3. Радиацион нуқтавий нуқсонлар
- 1.4. Стехиометрик нуқсонлар
- 1.5. Яримўтказгичларда киришмалар
- 1.6. Дислокациялар

Назорат саволлари

2-боб. Кристалларда нуқтавий нуқсонлар термодинамикаси

- 2.1. Асосий термодинамик катталиклар
- 2.2. Элементар кристалларда Френкель нуқсонлари концентрациясига температура таъсири
- 2.3. Элементар кристалларда Шоттки нуқсонлари концентрациясининг температурага боғлиқлиги
- 2.4. Дивакансиялар ва бирлашмалар ҳосил бўлиши
- 2.5. Бирикмалар ҳосил бўлиш механизмлари
- 2.6. Бинар бирикмаларда термик нуқсонлар

Назорат саволлари

3-боб. Яримўтказгичларда диффузион жараёнлар кинетикаси

- 3.1. Диффузия ва реакцияларнинг мутлоқ тезлиги назарияси
- 3.2. Суқилма киришма атомларининг диффузияси
- 3.3. Металларда ва бошқа элементар кристаллардаги диффузия
- 3.4. Қаттиқ эритмаларда суқилма атомлар диффузия
- 3.5. Диффузиянинг микроскопик назарияси
- 3.6. Кўп компонентли кристалларда атомлар диффузиясининг термодинамикаси

Назорат саволлари

4-боб. Яримўтказгичларда диффузия назариясининг баъзи масалалари

- 4.1. Бирикма ҳосил бўлишининг киришма атомлар диффузиясига таъсири
- 4.2. Ички электр майдонларининг диффузияга таъсири
- 4.3. Бир компонентли диффузия
- 4.4. Кўп компонентли диффузия
- 4.5. Диффузиянинг вакансияли механизмида кулонли ўзаро таъсир.

Яримўтказгичлардаги диффузия коэффиценти ва кимёвий потенциал сатҳ

4.6. Яримўтказгичларда диффузиянинг диссоциатив механизми

Назорат саволлари

5-боб. Кремнийда диффузия

5.1. Кремнийда донор ва акцепторли киришмалар диффузияси

5.2. IV гуруҳ элементларининг кремнийда диффузияси ва ўз атомлари диффузияси

5.3. Кремнийда литий ионларининг ҳаракатланчанлиги ва диффузияси

5.4. Ишқорий элементлар диффузияси

5.5. Кремнийдаги миснинг диффузияси

5.6. Кремнийда 3d-элементларнинг диффузияси

5.7. Кремнийда тез диффузияланувчи киришмалар

5.8. Доимий электр майдоннинг олтин ва кумушнинг кремнийдаги диффузиясига таъсири

5.9. Кремнийда газларнинг диффузияси, эрувчанлиги ва синиши

5.10. Германий ва кремнийда киришмаларнинг диффузия механизмидаги баъзи фарқлар тўғрисида

5.11. Кремнийда термик нуқсонлар

Назорат саволлари

6-боб. Яримўтказгичларда киришмаларнинг ўзаро таъсири

6.1. Киришмалар ўзаро таъсирининг кўринишлари

6.2. Статик ўзаро таъсирлар

6.3. Зарядли ўзаро таъсир

6.4. Бирикма ҳосил бўлишига олиб келувчи ўзаро таъсир

6.5. Қаттиқ жисмдаги нуқсонлар ионизацияси

Назорат саволлари

Тест

Мустақил ечиш учун масалалар

Фойдаланилган адабиётлар

Мундарижа