

თბილისის შრომის წითელი ფრინველს ორგანიზაციის
სახელმწიფო უნივერსიტეტი

ი. მირცხულავა

ნახევარგამტართა ფიზიკა

საქართველოს სსრ უმაღლესი და საშუალო სპეციალური განათლების
სამინისტროს მიერ დამტკიცებულია დამხმარე სახელმძღვანელოდ
ფიზიკის ფაკულტეტის სტუდენტებისათვის



თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა

თ ბ ი ლ ი ს ი 1979

ნაშრომში განხილულია მყარი სხეულების ფიზიკის ზოგიერთი საკითხი, რომელთა ცოდნა აუცილებელია ნახევარგამტართა ფიზიკის ძირითადი საკითხების გაგებისათვის. განიხილულია წონასწორული და არაწონასწორული მოვლენები, ელექტრული, ოპტიკური, მაგნიტური და სხვა თვისებები.

ფართოდ არის წარმოდგენილი კონტაქტური მოვლენები, $p-n$ გადასვლის თეორია და მასზე აგებული ნახევარგამტარული ხელსაწყოების მუშაობის ფიზიკური საფუძვლები.

წიგნი ძირითადად განკუთვნილია ფიზიკის ფაკულტეტის სტუდენტებისათვის. მასში მოცემული მასალები შეესაბამება უნივერსიტეტის ახალი სპეციალიზის „ნახევარგამტარები და დიელექტოიდები“-ს პროგრამას. ამავე დროს იგი გარკვეულ დახმარებას გაუწევს პოლიტექნიკური ინსტიტუტის საინჟინრო-ფიზიკური ფაკულტეტის სტუდენტებსაც.

რეცენზენტები: პროფ. ვ. სანაძე,

ფიზ.-მათ. მეცნიერებათა კანდიდატები—ა. გერასიმოვი და
ა. ცერცვაძე

რედაქტორი ზ. ქაჩლიშვილი

© თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა, თბილისი, 1979

შენახვალი

უკანასკნელ ხანებში ნახევარგამტარებში (აოპტალდომა სტრუქტურა) ფართო გამოყენება პოვეს მეცნიერებისა და ტექნიკის თითქმის ყველა სფეროში. ეს გარემოება იმით აიხსნება, რომ აოპტალდომა სტრუქტურა, მათი შემცველი სხვადასხვა ნივთიერების ატომებისაგან ჯერ გაწყვეტილსა და შემდეგ წინასწარ ცნობილი ნივთიერების ატომებს-გარკვეული თანფუნობით შეტანის გზით (ლევირებით), შეიძლება დანადადეს წინასწარ მოთხოვნილი თვისებების მასალები, ამა თუ იმ მეცნიერული ან პრაქტიკული ამოცანის გადაწყვეტის შესაბამისად. ამჟამად ნაოპტალდომა სტრუქტურაში დაგროვილია საკმარისად დიდი რაოდენობის მასალა ნახევარგამტარების ფიზიკური თვისებების და მათი პრაქტიკული გამოყენების საკითხებზე. ასე მაგალითად, თანამედროვე მიკროელექტრონიკა ძირითადად ეყრდნობა ნახევარგამტარებში მიმდინარე ფიზიკური პროცესების გამოყენებას.

მასალების დიდი რაოდენობა, რომელიც მოცემულია ცალკეულ სამეცნიერო შრომებსა და მონოგრაფიებში, ნაკლებად ხელმისაწვდომია სტრუქტურა ფართო მასებისათვის. საკითხების დიდი რაოდენობის გამო ერთ სახელმძღვანელოში მათი მოთავსება შეუძლებელია. სწორედ ამიტომ, ამჟამად არსებულ რუსულ და უცხოურ სახელმძღვანელოებში შეტანილია თითქმის ერთმანეთისაგან განსხვავებული მასალები. ქართულ ენაზე მოცემული სახელმძღვანელო ამ საგანში არ მოგვეპოვება, მიუხედავად იმისა, რომ მკარო სხეულების ფიზიკის სპეციალობა სახელმწიფო უნივერსიტეტში არსებობს 1932 წლიდან და 1954 წლიდან უშვებს ნახევარგამტართა ფიზიკის სპეციალისტებს. შეიძლება ითქვას, საქართველოში ფიზიკის ათე ერთი დარგი არ არის ისე ფართოდ წარმოდგენილი, როგორც ნახევარგამტარები.

1965 წლიდან საქართველოში საფუძველი ჩაეყარა ნახევარგამტარული მიკროელექტრონიკის განვითარებას, რომელიც წარმოადგენს თანამედროვე ტექნიკის განვითარების უმაღლეს ფორმას. მეორე მხრივ, თანამედროვე მეცნიერების ძალზე სწრაფი განვითარება იწვევს ტექნიკის სხვადასხვა დარგების სათანადო განვითარებას. ეს კი მოითხოვს ტექნიკური კადრების მაღალ თეორიულ მომზადებას. ამის გამო, უმაღლესი და საშუალო სპეციალური განათლების საკავშირო სამინისტროს ბრძანებით, მაღალი კვალიფიკაციის ტექნიკური კადრების მომზადება დაევალი უნივერსიტეტებსაც, სადაც სასწავლო პროგრამებში გათვალისწინებულია დამატებითი თეორიული საკითხები. უნივერსიტეტდამთავრებულ ტექნიკურ კადრებს სამინისტროს ბრძანების თანახმად ენიჭებათ „ინჟინერ-ფიზიკოსის“ სახელწოდება.

მაღალკვალიფიციური კადრების მომზადების ერთ-ერთი პირობაა სათანადო სახელმძღვანელოების არსებობა. ამიტომ ჩვენ შევეცა-

დეთ ათეული წლების მანძილზე თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში წაკითხული ლექციების მასალებზე შეგვედგინა მშობლიურ ენაზე დამხმარე სახელმძღვანელო ნახევარგამტარების ფიზიკაში, რომელიც შეესაბამება უნივერსიტეტის პროგრამას. ცხადია, იგი დიდ დახმარებას ჯაუწყებს არა მარტო უნივერსიტეტის, არამედ აგრეთვე ნახევარგამტარებისა და დიელექტრიკების სპეციალობის პოლიტექნიკური ინსტიტუტის სტუდენტებსაც. დამხმარე სახელმძღვანელო განკუთვნილია ნახევარგამტარებისა და დიელექტრიკების სპეციალობის ექსპერიმენტული განხრის სტუდენტებისათვის, ამიტომ იგი დაწერილია შედარებით მარტივი მათემატიკური აპარატის გამოყენებით და გამოტოვებულია ზოგიერთი წმინდა თეორიული საკითხი, რომელთა ცოდნა აუცილებელია ამ დარგის თეორეტიკოსებისათვის.

ნახევარგამტართა ფიზიკა წარმოადგენს მყარ სხეულთა ფიზიკის ნაწილს, ამიტომ ამ წიგნის პირველი ხუთი თავი დათმობილი აქვს მყარი სხეულების ფიზიკის ზოგიერთ საკითხს, რომელთა ცოდნა აუცილებელია ნახევარგამტარებში მიმდინარე პროცესების გაგებისათვის. ასეთებია: კრისტალების სტრუქტურა და მათი კლასიფიკაცია (თავი I), კრისტალური მესერის ნორმალური რხევები, აკუსტიკური და ოპტიკური შტოების წარმოშობა (თავი II), მეტალთა კლასიკური თეორიის სიმწვლეები და ზომერფელდის მეტალთა კვანტური თეორია (თავი III), კრისტალთა ზონური თეორია და ამ თეორიის საფუძველზე კრისტალების დაყოფა მეტალებად და არამეტალებად (თავი IV), დეფექტები კრისტალებში (თავი V). დანარჩენ შვიდ თავში მოცემულია ნახევარგამტართა ფიზიკის ძირითადი საკითხები: გადაგვარებული და არაგადაგვარებული ელექტრონული გაზის შემთხვევაში დენის გადამტანთა წონასწორული კონცენტრაციის განსაზღვრა (თავი VI), არაწონასწორული მოვლენები (თავი VII), გადატანის მოვლენები (თავი VIII), ნახევარგამტარების ზოგიერთი ოპტიკური და მაგნიტური თვისებები (თავი IX და X). დეტალურად განხილულია კონტაქტური მოვლენები გამართვის დიოდური და დიფუზიური თეორია, სადაც გამოყენებულია $p-n$ გადასვლა. ამავე თავში მოცემულია აგრეთვე განის ეფექტი და ნახევარგამტარული ლაზერის მოქმედების პრინციპი, რომელთა მუშაობის პრინციპი აგებულია სხვა ფიზიკურ პროცესებზე და არა $p-n$ გადასვლაზე. ცხადია, სხვადასხვა ფიზიკურ პრინციპებზე აგებული ნახევარგამტარული ხელსაწყოების რიცხვი იმდენად ბევრია, რომ მათი მოკლე აღწერა შდრს წაგვიყვანდა. ამიტომ წინამდებარე ნაშრომში ჩვენ დავკმაყოფილდით მხოლოდ ზოგიერთი მათგანის აღწერით.

შევეცადეთ მასალები გადმოგვეცა რაც შეიძლება მარტივად და გასაგებად, ჩთელი მათემატიკური აპარატის გამოყენების გარეშე, რათა მეტი ყურადღება მიგვექცია მოვლენების ფიზიკური არსისათვის. თუ რამდენადაა შესრულებული ეს პირობა, გვიჩვენებს ამ წიგნის საჰმიანი კრიტიკა.

კრისტალმზის სტრუქტურა და მათი კლასიფიკაცია

§ 1. ამორფული და კრისტალური სხეულები

მყარი მდგომარეობა შეიძლება იყოს ორგვარი—ამორფული და კრისტალური. მყარი სხეულის ნაწილაკები (ატომები, მოლეკულები, იონები და სხვა) მოცულობაში იკავებენ გარკვეულ წონასწორობულ მდგომარეობებს.

ამორფულ სხეულებში ეს ნაწილაკები განლაგებულია ქაოსურად — უწყესრიგოდ, ამიტომ სხეულის დამახასიათებელი მაკროსკოპული ფიზიკური სიდიდეები—ელექტროგამტარობა, სითბოგამტარობა, დიელექტრიკული მუდმივა, სინათლის გაერცელების სიჩქარე და სხვა, დამოკიდებული არ არის მიმართულებაზე. ასეთ სხეულს იზოტროპულს უწოდებენ, კრისტალურ სხეულში ნაწილაკები განლაგებული არიან გარკვეული გეომეტრიული კანონის მიხედვით, ასე მაგალითად: ერთნაირი ნაწილაკები პერიოდულად მეორდებიან გარკვეული ღერძების გასწვრივ სათანადოდ a_1 , a_2 და a_3 მანძილებზე, ამიტომ სხეულის ის თვისებები, რომლებიც დამოკიდებულია ნაწილაკთა შორის მანძილებზე სხვადასხვა მიმართულებით, სხვადასხვა იქნება. ასეთ სხეულებს ანიზოტროპულს უწოდებენ. კრისტალი ზოგიერთი თვისებებში მიმართ შეიძლება იყოს იზოტროპულიც. თუ სხეული შედგება მცირე ზომის კრისტალებისაგან და ისინი ქაოსურად არიან განლაგებული მოცულობის შიგნით, მაშინ, მიუხედავად იმისა, რომ ყოველი ასეთი კრისტალი ანიზოტროპულია, მათი ქაოსური განლაგების გამო სხეული შეიძლება მთლიანად იზოტროპული იყოს, ასეთ სხეულებს პოლიკრისტალურს უწოდებენ. თუ სხეული შედგება მხოლოდ ერთი კრისტალისაგან, მას მონოკრისტალს უწოდებენ. ამჟამად საქმარისად კარგად არის დამუშავებული დიდი ზომის მონოკრისტალების მიღების ტექნოლოგია, რომელსაც დიდი გამოყენება აქვს ტექნიკის სხვადასხვა სფეროში. კრისტალებში ნაწილაკების მოწყობილობითი (პერიოდული) განლაგება ძალზე ამარტივებს მათემატიკური აპარატის გამოყენებას. სწორედ ამით აიხსნება ის გარემოება, რომ ამჟამად კარგად არის ჩამოყალიბებული კრისტალების ფიზიკური თეორია. ხოლო რაც შეეხება ამორფულ სხეულებს, ნაწილაკების უწყესრიგოდ განლაგების გამო, ჭერაც

ვერ მოხერხდა მათთვის ფიზიკური თეორიის ჩამოყალიბება. ამიტომ მოცემულ კურსში განხილული იქნება მხოლოდ მარტივი სტრუქტურის კრისტალური სხეულების თეორია.

კრისტალების ერთ-ერთ დამახასიათებელ თვისებას წარმოადგენს მისი სიმეტრია. სიმეტრიის თვისებების შესწავლა დაგვეხმარება კრისტალების როგორც კლასიფიკაციის, ისე შინაგანი სტრუქტურის გარკვევაში. ამიტომ შემდეგ პარაგრაფში ჩვენ გავარჩევთ კრისტალური სხეულების სიმეტრიის ყველა სახეს და მათ თვისებებს.

§ 2. კრისტალების სიმეტრია, სიმეტრიის ელემენტები

მაკროსკოპიული სხეულის სიმეტრიაში იგულისხმება გადანაცვლებათა ისეთი ერთობლიობა, რომლებსაც სხეული თავის თავში გადაჰყავს. მათემატიკური თვალსაზრისით, სხეულის ყოველი გადანაცვლება დაკავშირებულია კოორდინატების სათანადო გარდაქმნასთან, ამიტომ გარდაქმნათა ერთობლიობას, რომელსაც სხეული თავის თავში გადაჰყავს, უწოდებენ სიმეტრიის გარდაქმნებს. სიმეტრიის გარდაქმნების გამოყენება მნიშვნელოვნად ამარტივებს მაკროსკოპიული სხეულის მათემატიკურ აღწერას, ვინაიდან სათანადო დიფერენციალური განტოლებები ინვარიანტული (უცვლელი) უნდა დარჩეს მოცემული სხეულის სიმეტრიის ყველა გარდაქმნის მიმართ. განტოლებათა ინვარიანტობიდან კი მიიღება მთელი რიგი მნიშვნელოვანი ფიზიკური დასკვნები.

მაკროსკოპიული სხეულის ყოველი შესაძლო სიმეტრია შეიძლება მივიღოთ სამი მარტივი სიმეტრიის ელემენტების კომბინაციის შედეგად, ესენია: ღერძის გარშემო მობრუნება რაიმე კუთხით, ზედაპირზე სარკული არეკვლა და გარკვეული მიმართულებით ტრანსლაცია (პარალელური გადატანა) რაიმე სიდიდეზე. უკანასკნელი, ე. ი. ტრანსლაციური სიმეტრია შეიძლება ახასიათებდეს მხოლოდ უსასრულო ზომის სხეულს, სასრულო ზომის სხეულს კი — პირველი ორი სახის სიმეტრია და აგრეთვე მათი გარკვეული სახის კომბინაციები.

თუ რომელიმე ღერძის გარშემო $\varphi = \frac{2\pi}{n}$ კუთხეზე მობრუნების შედეგად

გად სხეული თავის თავს ემთხვევა, მაშინ ასეთ ღერძს უწოდებენ n რიგის სიმეტრიის ღერძს. $n=1, 2, 3, \dots$ განსაზღვრავს სიმეტრიის ღერძის რიგს. $n=1$ -ს ეთანადება 2π , ანდა 0-ზე მობრუნდება. სათანადო სიმეტრიის გარდაქმნებს

$$\begin{aligned} x' &= x \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned} \quad (1.1)$$

უწოდებენ იგივე გარდაქმნებს.

აქ x, y და z არის წერტილის კოორდინატები გარდაქმნამდე.

შემდეგში $\frac{2\pi}{n}$ კუთხეზე მობრუნების ოპერაციას აღნიშნავთ C_n -ით. თუ Ox ღერძს ავიღებთ სიმეტრიის ღერძის გასწვრივ, მაშინ C_n ოპერაციას ეთანადება კოორდინატების შემდეგი გარდაქმნები:

$$\begin{aligned}x' &= x \cos \varphi_n - y \sin \varphi_n \\y' &= x \sin \varphi_n + y \cos \varphi_n \\s' &= s\end{aligned}\quad (1.2)$$

თუ C_n ოპერაციას მიმდევრობით ჩავატარებთ ორჯერ, სამჯერ და ა. შ. მივიღებთ სხეულის მობრუნებას აღებული ღერძის გარშემო $\pm 2\left(\frac{2\pi}{n}\right)$,

3 $\left(\frac{2\pi}{n}\right)$ და ა. შ. კუთხეებზე. შესაბამისი ოპერაციები შეიძლება ფორმალურად ჩაიწეროს შემდეგი სახით: C_n^2 , C_n^3 და ა. შ. თუ n არის ჯერადი p რიცხვისა, მაშინ ადვილად შეიძლება ვუჩვენოთ, რომ $C_n^p = C_{n/p}$. თუ C_n ოპერაციას მიმდევრობით ჩავატარებთ n -ჯერ, მივიღებთ სხეულის მობრუნებას 2π კუთხეზე, ე. ი. $C_n^n = C_1$, სადაც C_1 არის იგივეური გარდაქმნის ოპერაცია.

თუ რაიმე ზედაპირის მიმართ სარკული არეკვლის შედეგად სხეული თავის თავში გადადის, ასეთ ზედაპირს სიმეტრიის სიბრტყეს უწოდებენ. აღნიშნოთ ეს ოპერაცია σ -ით. თუ s ღერძი სიმეტრიის სიბრტყის მართობია, მაშინ σ ოპერაციას ეთანადება კოორდინატების შემდეგი გარდაქმნები:

$$x' = x, \quad y' = y \quad \text{და} \quad s' = -s \quad (1.3)$$

ადვილი წარმოსადგენია, რომ, თუ ამ ოპერაციას მიმდევრობით ჩავატარებთ ორჯერ, მივიღებთ იგივეურ გარდაქმნას

$$\sigma^2 = C_1$$

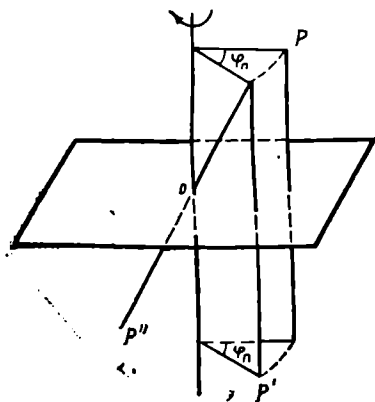
ზემოთ მოყვანილი ორი მარტივი სახის სიმეტრიის კომბინაციით შეიძლება მივიღოთ სიმეტრიის ახალი სახე — სარკული მობრუნების სიმეტრია. სხეულს გააჩნია n რიგის სარკული მობრუნების სიმეტრიის ღერძი, თუ $\varphi_n = \frac{2\pi}{n}$, კუთხეზე მობრუნებისა და შემდეგ ამ ღერძისადმი მართობ სიბრტყეზე არეკვლის შედეგად სხეული თავის თავში გადადის (ნახ. 1-ში p წერტილი გადადის p' -ში), ამ ოპერაციას აღნიშნავენ S_n -ით. ადვილი წარმოსადგენია, რომ ამ ორი ოპერაციის მიმდევრობის რიგს მნიშვნელობა არა აქვს, ამიტომ

$$S_n = C_n \sigma = \sigma C_n. \quad (1.4)$$

s_n ოპერაციას ეთანადება კოორდინატების შემდეგი გარდაქმნები

$$\begin{aligned}x' &= x \cos \varphi_n - y \sin \varphi_n \\y' &= x \sin \varphi_n + y \cos \varphi_n \\s' &= -s.\end{aligned}\quad (1.5)$$

განვიხილოთ კერძო შემთხვევა $n=2$. ამ დროს 180° კუთხეზე მობრუნებისა და შემდეგ ამ ღერძის მართობი სიმეტრიაზე სარკული არეკვლის



ნახ. 1.

შედგად სხეული თავის თავში გადადის. ვინაიდან ასეთი სახით სიმეტრიას ხშირად ვხვდებით კრისტალებში, ამიტომ მას გამოყოფენ s_n ოპერაციიდან და უწოდებენ ინვერსიას O წერტილის მიმართ (ნახ. 1-ში p და p'' წერტილები). ადვილი წარმოსადგენია, რომ ამ ოპერაციის შედეგად სხეულის ნებისმიერი წერტილის რადიუს-ვექტორი $r \rightarrow -r$ -ში. O წერტილს, რომლის მიმართ ვაწარმოებთ ინვერსიას, ეწოდება ინვერსიის ცენტრი ანდა სიმეტრიის ცენტრი. ინვერსიის ოპერაციას აღნიშნავენ I -თ, ამრიგად

$$I \equiv s_2 = C_2 \sigma, \quad (1.6)$$

ვინაიდან

$$\sigma^2 = C_4 \text{ და } I^2 = S_2^2 = C_4$$

ამიტომ

$$I\sigma = C_2 \text{ და } IC_2 = \sigma. \quad (1.7)$$

ჩვენ შეგვიძლია მივიღოთ აგრეთვე სხვა სახის სიმეტრიები ღერძის გარშემო მობრუნებასთან, ანდა ზედაპირზე სარკულ არეკვლასთან ტრანს-

ლაციის კომბინაციით. მაგალითად, თუ $\frac{2\pi}{n}$ კუთხეზე მობრუნებისა და

შემდეგ ამ ღერძის გასწვრივ რაიმე a მანძილზე ტრანსლაციის შედეგად სხეული გადადის თავის თავში, მაშინ ასეთი ხახის სიმეტრიას უწოდებენ

ხრახნული სიმეტრიის ღერძს. ადვილი წარმოსადგენია, რომ $\frac{2\pi}{n}$ კუთხეზე

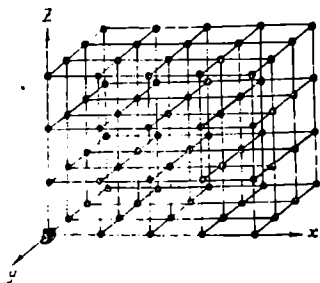
მობრუნება და შემდეგ a მანძილზე ტრანსლაცია მობრუნების ღერძის მართობი მიმართულებით არ იძლევა ახალი ტიპის სიმეტრიას, ვინაიდან

ასეთი ოპერაცია ტოლფასია მეორე ღერძის გარშემო მობრუნებისა, რომელიც პირველი ღერძის პარალელურია. ასეთი პარალელური ღერძები უსასრულო ზომის სხეულის შემთხვევაში ერთმანეთის ეკვივალენტურია. ასევე, შეგვიძლია შევადგინოთ კომბინაცია ტრანსლაციისა სარკულ არეკვლასთან. ამ შემთხვევაში ადვილი საჩვენებელია, რომ ახალი ტიპის სიმეტრია მიიღება მხოლოდ მაშინ, თუ სხეული თავის თავს ემთხვევა სიბრტყეზე, არეკვლის ოპერაციისა და შემდეგ ამ სიბრტყის მართობული მიმართულებით რაიმე a მანძილზე, ტრანსლაციის ოპერაციის მიმდევრობითი ჩატარების შედეგად. უკანასკნელი ორი ტიპის სიმეტრია დამახასიათებელია მხოლოდ უსასრულო ზომის სხეულისათვის. სასრული ზომის სხეულისათვის სიმეტრიის სახეებს შეადგენენ: სიმეტრიის სიბრტყეები, n -რიგის სიმეტრიის ღერძები და მათი კომბინაციები. სიმეტრიის ამ ელემენტებს აუცილებლად ექნებათ ერთი საერთო გადაკვეთის წერტილი, ამიტომ სიმეტრიის ამ ჯგუფებს უწოდებენ წერტილოვან ჯგუფებს.

§ 3. კრისტალური მონაკრები ბრავეს მონაკრები

კრისტალი წარმოადგენს ნაწილაკთა ერთობლიობას, რომლებიც სივრცეში განაწილებულია გარკვეული გეომეტრიული კანონის მიხედვით და ადგენენ ე. წ. სივრცით კრისტალურ მესერს. ნაწილაკების ასეთი მოწყობილობა განაწილება სივრცეში ამჟამად საგნებით დადასტურებულია. რენტგენოგრაფიული მეთოდების გამოყენებით. ამიტომ კრისტალების მესერული თეორია, რომელსაც საფუძველი ჩაუყარეს ბრავემ, ზონდემ, ფედოროვმა და შენფლიქსმა, შეიძლება გამოყენებული იქნეს კრისტალების სტრუქტურისა და მათი თვისებების შესასწავლად. დავიწყეთ მარტივი სტრუქტურის კრისტალების განხილვით. ავიღოთ კრისტალის რომელიმე ნაწილაკი და მას დაველკავშიროთ კოორდინატთა სათავე O , თუ მოვახდენთ ამ წერტილის გადატანას (ტრანსლაციას) Ox ღერძის მიმართულებით რაიმე a_1 , $2a_1$, $3a_1$ და ა. შ. სიდიდეზე, მივიღებთ a_1 მანძილით დამორბეულ წერტილთა ერთობლიობას. თუ მიღებულ წერტილთა ერთობლიობას თავისი თავის პარალელურად გადავიტანთ Oy ღერძის მიმართულებით a_2 , $2a_2$ და ა. შ. მანძილებზე, მივიღებთ Oxy სიბრტყეზე წერტილთა ერთობლიობას. დასასრულს, თუ მიღებულ წერტილთა ბრტყელ სისტემას გადავიტანთ თავისი თავის პარალელურად Oz ღერძის მიმართულებით რაიმე a_3 , $2a_3$, $3a_3$ და ა. შ., მივიღებთ წერტილთა სივრცულ სისტემას. წერტილთა სივრცულ სისტემას, რომელიც შეიძლება მივიღოთ ერთი წერტილის პერიოდული გადატანით სამი არაკომპლანარული მიმართულებით და ამ გადატანათა ნებისმიერი კომბინაციით, ეწოდება მარტივი სივრცული მესერი ანდა ბრავეს მესერი (ნახ. 2). a_1 , a_2 და a_3 სიდიდეებს უწოდებენ მესერის პარამეტრებს ანდა ძირითად პერიოდებს, მასზე აგებულ პარალელებიპედს კი — ელემენტარულ უჯრედს. თუ მოვახდენთ მესერის

ტრანსლაციას ძირითადი პერიოდების სიდიდეზე, მესერი თავის თავს დაემთხვევა (იგულისხმება, რომ მესერი უსასრულო ზომისაა), ამიტომ მესერის ძირითად პერიოდებს ხშირად ტრანსლაციურ პერიოდებს უწოდებენ. მესერის ტრანსლაციური პერიოდების რიცხვი უსასრულოა. მართ-



ნახ. 2.

ლაც, მესერის ნებისმიერი კვანძის რადიუს-ვექტორი მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$\mathbf{a} = \sum_1^3 n_i \mathbf{a}_i, \quad (1.8)$$

სადაც n_i მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვებია, $\mathbf{a}_i$ —მესერის ძირითადი პერიოდებია. შემდეგში ასეთ $\mathbf{a}$ ვექტორს ვუწოდოთ მესერის მთელკომპონენტებიანი ვექტორი. ცხადია, რომ, თუ მოვახდენთ

მესერის ტრანსლაციას $\mathbf{a}$ სიდიდეზე, იგი თავის თავს დაემთხვევა, ამიტომ $\mathbf{a}$ ვექტორთა ერთობლიობას უწოდებენ ტრანსლაციურ ჯგუფს. ამრიგად, სივრცული მესერი შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ერთნაირი ზომისა და ფორმის უჯრედების ერთობლიობა, მასთან ყოველი ელემენტარული უჯრედი მიიღება ერთ-ერთი უჯრედის ტრანსლაციით $\mathbf{a}$ სიდიდეზე.

ადვილი საჩვენებელია, რომ მესერის ძირითადი პერიოდები შეიძლება არჩეულ იქნეს მრავალი გზით. მართლაც, ვთქვათ $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ და $\mathbf{a}_3$ მესერის ძირითადი პერიოდებია, მაშინ მესერის ნებისმიერი მთელკომპონენტებიანი ვექტორი მოიცემა ფორმულით

$$\mathbf{a}' = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{a}_k, \quad (1.9)$$

სადაც α_{ik} —მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვებია. თუ α'_1 , α'_2 და α'_3 სიდიდეებს ავიღებთ მესერის ძირითად პერიოდებად, მაშინ მესერის ნებისმიერი მთელკომპონენტებიანი ვექტორი, კერძოდ $\mathbf{a}_i$, მოცემული იქნება ანალოგიური ფორმულით

$$\mathbf{a}_i = \sum_k \beta_{ik} \mathbf{a}'_k, \quad (1.10)$$

სადაც β_{ik} მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვებია. დეტერმინანტი (α_{ik}) იძლევა გადასვლას $\mathbf{a}_i$ სიდიდეებიდან $\mathbf{a}'_i$ სიდიდეებზე, ხოლო დეტერმინანტი (β_{ik})—შებრუნებულ გადასვლას $\mathbf{a}'_i \rightarrow \mathbf{a}_i$. ცნობილია, რომ შებრუნებული გადასვლის დეტერმინანტი უდრის პირდაპირი გადასვლის დეტერმინანტის შებრუნებულ სიდიდეს,

$$|\beta_{ik}| = \frac{1}{|\alpha_{ik}|}. \quad (1.11)$$

მაგრამ $|\beta_{ih}|$ და $|\alpha_{ih}|$ მთელი რიცხვებია, ამიტომ უკანასკნელი განტოლება დაკმაყოფილებული იქნება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ

$$|\beta_{ih}| = |\alpha_{ih}| = 1. \quad (1.12)$$

ამრიგად, a_i ანდა a'_i სიდიდეები შეიძლება მივიჩნიოთ ასევე ძირითად პერიოდებად, თუ დაკმაყოფილებული იქნება ტოლობა (1.12).

ძირითადი პერიოდების შერჩევის შესაბამისად, ცხადია, შეიცვლება ელემენტარული უჯრედის ფორმა, სამაგიეროდ უჯრედის მოცულობა უცვლელი რჩება, მართლაც, a_i პერიოდებზე აგებული ელემენტარული უჯრედის მოცულობა უდრის

$$V = ([a_1 a_2] \cdot a_3), \quad (1.12a)$$

ასევე a'_i პერიოდებზე აგებული უჯრედის მოცულობა

$$V' = ([a'_1 \cdot a'_2] \cdot a'_3),$$

თუ ამ უკანასკნელში შევიტანთ a'_i -ს მნიშვნელობებს, მოცემულს (1.9) ფორმულით და გავითვალისწინებთ, რომ ერთნაირი ვექტორების ვექტორული ნამრავლი ნულის ტოლია, მაშინ პირობა (1.12) მოგვცემს:

$$V' = V.$$

მიღებული შედეგის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ შემდეგი მაგალითი: ეთქვათ, ძირითად პერიოდებად აღებულია a_1 , a_2 და a_3 სიდიდეები, მაშინ უჯრედის მოცულობა მოიცემა (1.12a) ფორმულით. მესერის ახალი პერიოდები a'_1 , a'_2 და a'_3 შევარჩიოთ შემდეგნაირად:

$$\begin{aligned} a'_1 &= a_1 \\ a'_2 &= a_1 + a_2 \\ a'_3 &= a_3 \end{aligned}$$

ასეთი გარდაქმნის დეტერმინანტი

$$|\alpha_{ih}| = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1.$$

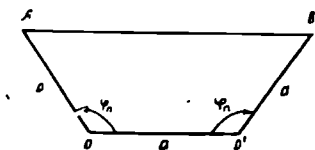
ახალი ელემენტარული უჯრედის მოცულობა იქნება

$$V' = ([a'_1 a'_2] a'_3) = ([a_1, a_1 + a_2] a_3) = ([a_1 a_2] a_3) = V.$$

ამრიგად, ასეთნაირად შერჩეული a'_i ვექტორები ნამდვილად წარმოადგენენ მესერის ძირითად პერიოდებს. კრისტალის მესერულ თეორიაზე დაყრდნობით შეიძლება დავამტკიცოთ სიმეტრიის ზოგიერთი ელემენტის არსებობა. მაგალითად, შეიძლება არსებობდეს მხოლოდ 2, 3, 4 და 6 რიგის სიმეტრიის ღერძები, მე-5 რიგის სიმეტრიის ღერძის არსებობა გამორიცხულია. ამის დასამტკიცებლად დავუშვათ, რომ ბრავეს მესერს გააჩნია n რიგის სიმეტრიის ღერძი. სიმარტივისათვის მივიღოთ, რომ

სიმეტრიის ღერძი მიმართულია ნახაზის სიბრტყის მართობულად და გადის მესერის რომელიმე კვანძწერტილში o (ნახ. 3), ვინაიდან მესერი უსასრულო ზომისაა, ასეთივე სიმეტრიის ღერძი უნდა გადიოდეს მესერის მეორე o' კვანძში, რომელ o კვანძიდან დაშორებულია რაიმე a მანძილით. n რიგის სიმეტრიის ღერძის განმარტების თანახმად, o წერტილის გარშემო $\varphi_n = \frac{2\pi}{n}$ კუთხეზე მობრუნების დროს მესერი უნდა დაემთხვეს

თავის თავს. ამ დროს o' კვანძი დაემთხვევა მესერის რომელიმე A კვანძს.



ნახ. 3.

ასევე o' ღერძის გარშემო φ_n კუთხეზე მობრუნება მოგვცემს o კვანძის შეთავსებას მესერის რომელიმე B კვანძთან. ვინაიდან A და B წერტილები არიან იმავე ბრავეს მესერის კვანძწერტილები, ამიტომ $AB = Pa$, სადაც P მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვია.

თანახმად ნახ. 3-ისა, შეგვიძლია დავწეროთ

$$Pa = a - 2a \cos \varphi_n.$$

აქედან

$$\cos \varphi_n = \frac{1-P}{2}.$$

ვინაიდან $|\cos \varphi_n| \leq 1$, ამიტომ შესაძლებელია P -ს შემდეგი მნიშვნელობები: 3, 2, 1, 0 და -1 . P -ს ამ მნიშვნელობებს ეთანადებიან φ_n -ის შემდეგი მნიშვნელობები

180, 120, 90, 60 და 0 (ანდა 360)

რადგანაც ღერძის რიგი $n = \frac{\varphi_n}{2\pi}$, ვლელობთ

$$n = 2, 3, 4, 6 \text{ და } 1.$$

მაშასადამე, მესერულ თეორიაზე დაყრდნობით, ბრავეს მესერში შესაძლებელია მხოლოდ მეორე, მესამე, მეოთხე, მეექვსე და პირველი რიგის სიმეტრიის ღერძების არსებობა. ცდები საცესებით ადასტურებს მიღებულ შედეგებს.

მარტივ (ბრავეს) მესერში ერთნაირი ნაწილაკები მოთავსებულია ელემენტარული უჯრედის წვეროებზე, ამიტომ თითოეულ უჯრედზე მოდის ერთი ნაწილაკი. მართლაც, უჯრედის ყოველ წვეროსთან შეხებაშია ასეთივე 8 უჯრედი, ამიტომ ყოველ წვეროზე მოთავსებული ნაწილაკის მერვედი ეკუთვნის აღებულ უჯრედს და, რადგანაც ყოველ უჯრედს რვა წვერო აქვს, უჯრედზე მოდის ერთი ნაწილაკი. ბუნებაში ხშირად ვხვდებით

უფრო რთული აგებულების კრისტალებს, როდესაც კვანძწერტილების მახლობლობაში მოთავსებულია გარკვეული სიმეტრიით განლაგებულ ნაწილაკთა სისტემა. ამ უკანასკნელს შეიძლება ჰქონდეს აგრეთვე სიმეტრიის სხვადასხვა ელემენტები: ღერძები, სიბრტყეები და სხვა. ასეთი აგებულების მესერს ეწოდება რთული მესერი. ამრიგად, რთული მესერის შემთხვევაში უჩრდელზე მოდის ერთზე მეტი ნაწილაკი. ნაწილაკები შეიძლება მოთავსებული იყოს უჩრდელის წვეროებზე, წახნაგებზე, მოცულობის შიგნით და სხვა. თუ ნაწილაკი მოთავსებულია უჩრდელის შიგნით, იგი მთლიანად ეკუთვნის მას. თუ ნაწილაკი მოთავსებულია უჩრდელის წახნაგზე, მაშინ ნაწილაკის ნახევარი მიეკუთვნება აღებულ უჩრდელს, ვინაიდან ერთმანეთთან შეხებაშია ორი მეზობელი უჩრდელი. თუ ნაწილაკები მოთავსებულია უჩრდელის წიბოზე, მაშინ ამ ნაწილაკის მეოთხედი მიეკუთვნება აღებულ უჩრდელს, რადგან შეხებაში იმყოფება ოთხი ანალოგიური უჩრდელი და სხვა. მესერის ყველა უჩრდელი საგვებით იდენტურია ერთმანეთის, შეიცავენ ერთნაირი ბუნებისა და ორიენტაციის ნაწილაკთა ჯგუფებს. ყოველი რთული მესერი შეიძლება წარმოვიდგინოთ, როგორც ერთმანეთში ჩადგმული მარტივ (ბრავეს) მესერთა ერთობლიობა. მასთან რთული მესერის ყოველი მარტივი მესერი შეიძლება ერთმანეთს შევათავსოთ სიმეტრიის რომელიმე ელემენტის (მობრუნების, არეკვლის ან ტრანსლაციის) გამოყენებით.

დასასრულს განვიხილოთ რთული მესერის კერძო სახე—ტრანსლაციური მესერი. ეს ისეთი მესერია, რომლის ყოველი მარტივი (ბრავეს) მესერი მიიღება ერთი რომელიმე მარტივი მესერის ტრანსლაციით. მაგალითად, დავუშვათ, რომ ნაწილაკები მოთავსებულია უჩრდელის წვეროებზე და მის ცენტრში. ავიღოთ საწყისად უჩრდელის წვეროსთან მდებარე ნაწილაკი და მოვახდინოთ ამ ნაწილაკის გადატანა სამი არაკომპლანარული მიმართულებით მესერის პერიოდებით, მივიღებთ პირველ ბრავეს მესერს, რომლის უჩრდელთა წვეროებზე მოთავსებულია იდენტური ნაწილაკები. ასეთი გადატანის გზით ჩვენ ვერ მივიღებთ რთული მესერის უჩრდელის ცენტრში მდებარე ნაწილაკებს (იმავე ან სხვა ტიპისა). მაგრამ თუ საწყის წერტილად ავიღებთ უჩრდელის ცენტრში მოთავსებულ ნაწილაკს და მოვახდენთ მის გადატანას მესერის პარამეტრებით, მივიღებთ მეორე ბრავეს მესერს, რომლის ელემენტარული უჩრდელის წვეროებზე მოთავსებული იქნებიან რთული მესერის უჩრდელების ცენტრებში მოთავსებული ატომები. ამრიგად, მოცემული რთული მესერი წარმოადგენს ერთიმეორეში ჩადგმული ორი ბრავეს მესერთა ერთობლიობას. ამასთან, ერთი ბრავეს მესერი მიიღება მეორე ბრავეს მესერის ტრანსლაციით უჩრდელის დიაგონალის გასწვრივ, ამ დიაგონალის ნახევარ სიდიდეზე. ამიტომ აღებულ რთული მესერი წარმოადგენს ტრანსლაციურ მესერს. ანალოგიურად შეიძლება ვიმსჯელოთ იმ შემთხვევაშიც, როდესაც რთული მესერის ნაწილაკები მო-

თავსებულია უჯრედის წვეროებზე, წახნაგებზე ან წიბოებზე. შესაბამისად ამისა, სათანადო მესერს უწოდებენ მოცულობით ცენტრირებულს, წახნაგ-ცენტრირებულს და ა. შ.

მაგალითად:

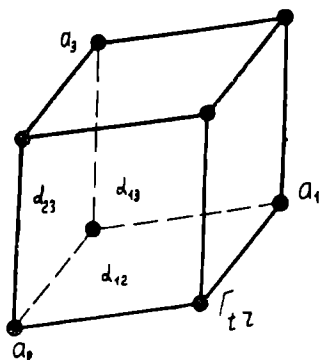
1. კრისტალი NaCl შედგება ორი მესერისაგან, რომლებსაც აღვნიშნავთ Na^+ -სა და Cl^- -ის იონები. თითოეული მათგანი წარმოადგენს წახნაგ-ცენტრირებულ მესერს.

2. CsCl მესერი შედგება ორი მარტივი კუბური მესერისაგან. ამასთან, ერთი მესერი მეორის მიმართ გადაწეულია უჯრედის სივრცითი დიაგონალის გასწვრივ, ამ დიაგონალის ნახევრის სიდიდით.

3. ალმასის მესერი (ამ ტიპის მესერი გააჩნია Ge და Si კრისტალებს) წარმოადგენს ორ მარტივ კუბურ მესერთა ერთობლიობას. ამასთან, ერთი მესერი მეორის მიმართ გადაწეულია უჯრედის სივრცითი დიაგონალის გასწვრივ ამ დიაგონალის $1/4$ სიდიდეზე. წინა ორი მესერისაგან განსხვავებით, ალმასის მესერის ყველა ატომი ერთნაირია, მაგრამ ტრანსლაციულად ეკვივალენტური არ არიან.

§ 4. კრისტალური სისტემები

სხეულის სიმეტრიის ელემენტების სრული ერთობლიობა განსაზღვრავს კლასს. გარეგნულად სხეულს შეიძლება ჰქონდეს სულ სხვადასხვა ფორმა, მაგრამ ჰქონდეს სიმეტრიის ელემენტების ერთი და იგივე ერთობლიობა, ამ შემთხვევაში ისინი მიეკუთვნებიან ერთსა და იმავე კლასს.



ნახ. 4.

ცდა და თეორიული გამოკვლევები გვიჩვენებენ, რომ ბუნებაში შეიძლება არსებობდეს კრისტალების 32 სხვადასხვა კლასი, რომლებიც იმისდამოკიდებულია, თუ როგორი და რამდენი სიმეტრიის ღერძი შედის სიმეტრიის ელემენტების ერთობლიობაში, იყოფა შეიძლება სისტემადად. ეს სისტემები მიეკუთვნებიან ერთ-ერთ წერტილოვან ჯგუფს.

1. ტრიკლინური სისტემა. ეს სისტემა ყველაზე ნაკლებად სიმეტრიულია. მას არ გააჩნია არც ერთი სიმეტრიის ელემენტი. ამ სისტემის მესერის ელემენტარული უჯრედი

ნაჩვენებია ნახ. 4-ზე. ელემენტარული უჯრედის წახნაგები და მათ შორის მოთავსებული კუთხეები განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან:

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

$$(\alpha = \alpha_{12}, \beta = \alpha_{13} \text{ და } \gamma = \alpha_{23}).$$

კვანძები მოთავსებულია ელემენტარული უჯრედის წვეროებზე. ტრიკლინური სისტემის მესერს აღნიშნავენ $I_{\bar{1}}$ -თი. ეს სისტემა მოიცავს ორ კლასს.

2. მონოკლინური სისტემა. ეს სისტემა უფრო სიმეტრიულია, ვიდრე წინა სისტემა. მათ გააჩნიათ ერთი მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძი. ეს არის სიმეტრია პარალელუპიპედისა ნებისმიერი ფუძით

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \text{ და } \beta \neq 90^\circ,$$

ამ სისტემის ტრანსლაციური (ბრავეს) მესერი შეიძლება განხორციელდეს ორი გზით.

ა) მარტივი მონოკლინური სისტემა (I_m).—კვანძები მოთავსებულია პარალელუპიპედის წვეროებზე.

ბ) მესერი ცენტრირებული ფუძეებით (I_m^b).—კვანძები მოთავსებულია პარალელუპიპედის წვეროებსა და ფუძეებზე.

ეს სისტემა მოიცავს სამ კლასს.

3. რომბული სისტემა (ორთოგონალური სისტემა). ეს არის სიმეტრია სწორკუთხოვანი პარალელუპიპედისა ნებისმიერი წახნაგებით

$$a_1 \neq a_2 \neq a_3$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ.$$

სიმეტრიის ელემენტებია მეორე რიგის სიმეტრიის ღერძები. ამ სისტემის ტრანსლაციური მესერი შეიძლება განხორციელდეს ოთხი გზით.

ა) მარტივი მესერი (I_0)—კვანძები მოთავსებულია პარალელუპიპედის წვეროებზე.

ბ) ფუძეცენტრირებული მესერი (I_0^b). კვანძები მოთავსებულია პარალელუპიპედის წვეროებზე და ფუძეებზე.

გ) მოცულობით ცენტრირებული (I_0^c)—კვანძები მოთავსებულია პარალელუპიპედის წვეროებზე და ცენტრში.

დ) წახნაგცენტრირებული მესერი (I_0^f)—კვანძები მოთავსებულია პარალელუპიპედის წვეროებზე და წახნაგებზე.

ეს სისტემა მოიცავს 3 კლასს.

4. ტეტრაგონალური (კვადრატული) სისტემა, ეს არის სიმეტრია სწორი პრიზმისა კვადრატული ფუძით $a_1 = a_2 \neq a_3$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, რომელსაც გააჩნია ერთი მეოთხე რიგის სიმეტრიის ღერძი. ამ სისტემის ტრანსლაციური (ბრავეს) მესერი შეიძლება განხორციელდეს ოქნეს ორი გზით:

ა) მარტივი ტეტრაგონალური მესერი (Γ_4)—კვანძები მოთავსებულია პარალელეპედის წვეროებზე.

ბ) მოცულობით ცენტრირებული ტეტრაგონალური მესერი (Γ_2^*)—კვანძები მოთავსებულია პარალელეპედის წვეროებზე და ცენტრში.

ეს სისტემა მოიცავს 7 კლასს.

5. რ ო მ ბ ო ე რ უ ლ ი სისტემა (ტრიგონალური სისტემა)—ეს არის სიმეტრია რომბოედრისა—ფიგურა, რომელიც მიიღება კუბის გაჭიმვით სივრცითი დიაგონალის გასწვრივ, გააჩნია ერთი მესამე რიგის სიმეტრიის ღერძი

$$a_1 = a_2 = a_3$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ.$$

შესაძლებელია ამ სისტემის მხოლოდ ერთი მესერი (Γ_{rh})—კვანძები მოთავსებულია რომბოედრის წვეროებზე,

ეს სისტემა მოიცავს 5 კლასს.

6. ჰ ე ქ ს ა გ ო ნ ა ლ უ რ ი სისტემა.—ეს არის სიმეტრია ექვსწახნაგა სწორი პრიზმისა (ნახ. 5).

$$\alpha = 120^\circ \quad \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a_1 = a_2$$

a_3 ნებისმიერია,

გააჩნია ერთი მეექვსე რიგის სიმეტრიის ღერძი.

ამ შემთხვევაში ელემენტარულ უჯრედად აღებულია არა პარალელეპედი, არამედ წესიერი ექვსწახნაგა პრიზმა. შესაძლებელია ამ სისტემის მხოლოდ ერთი ბრავეს მესერი Γ_h —კვანძები მოთავსებულია წესიერი ექვსწახნაგა პრიზმის წვეროებზე.

ეს სისტემა მოიცავს 7 კლასს.

7. კ უ ბ უ რ ი ს ი ს ტ ე მ ა. ეს არის სიმეტრია კუბისა

$$a_1 = a_2 = a_3 \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

სიმეტრიის ელემენტებია: სამი ურთიერთმართობი მეოთხე რიგის სიმეტრიის ღერძი.

შესაძლებელია ამ სისტემის სამი ტრანსლაციური (ბრავეს) მესერის განხორციელება:

ა) მარტივი კუბური მესერი (Γ_c).—კვანძები მოთავსებულია კუბის წვეროებზე.

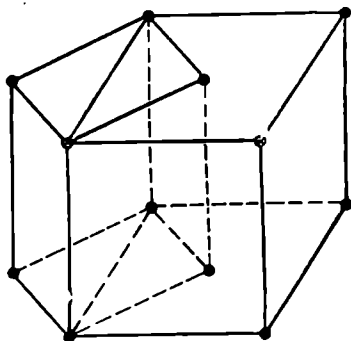
ბ) მოცულობით ცენტრირებული კუბური მესერი (Γ_2^*),—კვანძები მოთავსებულია კუბის წვეროებზე და ცენტრში.

გ) წახნაგცენტრირებული კუბური მესერი (Γ_f). კვანძები მოთავსებულია კუბის წვეროებზე და წახნაგებზე. როგორც ვხედავთ, შვიდი მარ-

ტივი მესერიდან მოცულობისა და წახნაგების ცენტრირებით მივიღეთ 14 ტრანსლაციური (ბრავეს) მესერი. ადვილად შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ იმ მარტივ მესერებში, სადაც ცენტრში, წახნაგებზე ან ფუძეებზე ცენტრირება (დამატებითი კვანძების დასმა) არ მოგვიხდენია, თუ დავსვამთ დამატებით კვანძებს, ასევე მივიღებთ ერთ-ერთ ზემოთ მოყვანილ ტრანსლაციურ მესერს. მაგალითად, ავიღოთ ტეტრაგონალური სისტემა და მის ზედა და ქვედა ფუძეებზე დავსვათ დამატებითი კვანძები. მაშინ, როგორც ეს ნახ. 6-დან ჩანს, მიიღება ისევე მარტივი ტეტრაგონალური სისტემა.

ადვილი საჩვენებელია, რომ ზემოთ მოყვანილი 14 მესერი არის ტრანსლაციური (ბრავეს) მესერი. მართლაც, განვიხილოთ Γ_c^V მესერი. ელემენტარულ უჯრედში (თუ ელემენტარულ უჯრედად ავიღებთ კუბს) იმყოფება ორი ატომი. კვანძები მოცემულია შემდეგი ტოლობით:

$$l = l_1 a_1 + l_2 a_2 + l_3 a_3$$



ნახ. 6.

წვეროზე მდებარე კვანძებისათვის და

$$l^* = \left(l_1 + \frac{1}{2}\right) a_1 + \left(l_2 + \frac{1}{2}\right) a_2 + \left(l_3 + \frac{1}{2}\right) a_3$$

უჯრედის ცენტრში მდებარე კვანძებისათვის.

სადაც l_1 , l_2 და l_3 მთელი რიცხვებია. მაგრამ, თუ ავიღებთ

$$a'_1 = \frac{1}{2} (-a_1 + a_2 + a_3),$$

$$a'_2 = \frac{1}{2} (a_1 - a_2 + a_3),$$

$$a'_3 = \frac{1}{2} (a_1 + a_2 - a_3),$$

მაშინ Γ_c^V მესერის ყველა კვანძი მოიცემა შემდეგი ვექტორით

$$l' = l_1 a'_1 + l_2 a'_2 + l_3 a'_3,$$

სადაც l_1 , l_2 და l_3 მთელი რიცხვებია. $l_1 + l_2 + l_3$ ჯამის კენტ მნიშვნელობას ეთანადება კუბის ცენტრები, ხოლო ლუწ მნიშვნელობას—კუბის წვერო-

ები. ამრიგად Γ_V^V მესერი მართლაც ტრანსლაციური მესერია, რომლის ყოველი კვანძი შეიძლება მიღებული იქნეს a_1 , a_2 და a_3 სიდიდეებზე ტრანსლაციით. სრულიად ასევე Γ_V^I მესერისათვის. თუ ბაზისურ ვექტორებად ავიღებთ შემდეგ ვექტორებს

$$a_1' \left(0, \quad \frac{1}{2} a, \quad \frac{1}{2} a \right),$$

$$a_2' \left(\frac{1}{2} a, \quad 0, \quad \frac{1}{2} a \right),$$

$$a_3' \left(\frac{1}{2} a, \quad \frac{1}{2} a, \quad 0 \right),$$

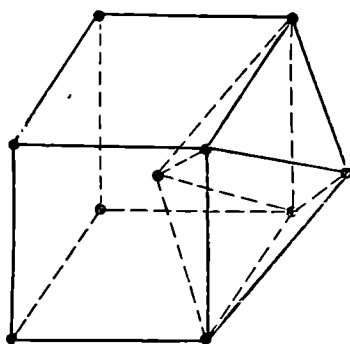
მაშინ ამ სამი ვექტორის წრთივი კომბინაცია

$$I' = l_1 a_1' + l_2 a_2' + l_3 a_3'$$

მთვევს Γ_V^I მესერის ყველა კვანძს. მაშასადამე, ეს მესერიც ტრანსლაციურია და ა. შ.

იგივე ითქმის დანარჩენ შემთხვევაშიც.

ზშირად უჯრედს უწოდებენ პრიმიტიულს, თუ მისი მოცულობა მინიმალურია. მაგალითად, განვიხილოთ მოცულობით ცენტრირებული მესერი Γ_V^V . თუ უჯრედად ავიღებთ კუბს, მაშინ მისი მოცულობა არ იქნება მინიმალური. მინიმალური მოცულობა



ნახ. 7.

ექნება რომოდრს (თუ მას ავიღებთ მესერის უჯრედად), რომლის მოცულობა ორჯერ ნაკლებია კუბის მოცულობაზე (ნახ. 7). თუ Γ_V^V მესერს განვიხილავთ როგორც რომბოდრულს; მაშინ იგი მარტივი მესერია, რადგანაც ნაწილაკები მოთავსებული არიან მხოლოდ რომბოდრის წვეროებზე. თუ Γ_V^V მესერს განვიხილავთ, როგორც კუბურს, იგი რთული მესერია. პირველ შემთხვევაში უჯრედს არ გააჩნია ის სიმეტრია, რომელიც აქვს თვით მესერს, ხოლო მეორე შემთხ-

ვევაში უჯრედს გააჩნია იგივე სიმეტრია, რაც მესერს. იგივე ითქმის დანარჩენ შემთხვევებშიც.

§ 5. ზეგარეშული მახასიათებელი. მიღების ინდიკატორები

კრისტალების ყველა დამახასიათებელ სიდიდეს აქვს იგივე პერიოდულობა, რაც მესერს, ასეთ სიდიდეებს შეადგენენ, მაგალითად: ატომების

მიერ შექმნილი ელექტრომაგნიტური ველი, ატომების ელექტრული მუხტების სიმკვრივე, მესერის ამა თუ იმ წერტილში ატომის ყოფნის ალბათობა და სხვა. აღნიშნოთ u -თი რომელიმე ზემოთ აღნიშნული სიდიდეებიდან. u დამოკიდებულია კრისტალში წერტილის კოორდინატებისაგან, ამასთან, ზემოთქმულის თანახმად, $u(r)$ -ს უნდა ჰქონდეს იგივე პერიოდულობა, რაც კრისტალურ მესერს, ე. ი.

$$u(r+a)=u(r), \quad (1.13)$$

სადაც

$$a = \sum_{i=1}^3 n_i a_i.$$

პერიოდული ფუნქცია $u(r)$ დაეშალოთ ფურიეს სამმაგ მწკრივად:

$$u(r) = \sum_b u_b e^{i2\pi(b \cdot r)}, \quad (1.14)$$

სადაც u_b არის ფურიეს კოეფიციენტი, b ვექტორია, რომელსაც თანახმად (1.14) დამოკიდებულებისა, სიგრძის შებრუნებული განზომილება აქვს. ამ ვექტორის ყველა შესაძლო მნიშვნელობა მიიღება $u(r)$ -ის პერიოდულობის პირობიდან:

$$u(r+a_1)=u(r+a_2)=u(r+a_3)=u(r),$$

ამიტომ (1.14) დამოკიდებულების საფუძველზე, გვექნება

$$e^{i2\pi b a_i} = 1.$$

აქედან ვღებულობთ

$$\begin{aligned} a_1 b_1 &= g_1 \\ a_2 b_2 &= g_2 \\ a_3 b_3 &= g_3, \end{aligned} \quad (1.15)$$

სადაც g_1, g_2, g_3 მთელი დადებითი ან უარყოფითი რიცხვებია, ადვილად შეიძლება შევამოწმოთ, რომ (1.15) დამოკიდებულებანი გვაძლევენ შემდეგ ამოხსნას

$$b = g_1 b_1 + g_2 b_2 + g_3 b_3. \quad (1.16)$$

სადაც

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{V} [a_2 \ a_3] \\ b_2 &= \frac{1}{V} [a_3 \ a_1] \\ b_3 &= \frac{1}{V} [a_1 \ a_2], \end{aligned} \quad (1.17)$$

V არის ძირითადი მესერის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა. $[a_i, a_k]$ წარმოადგენს ელემენტარული უჯრედის ერთ-ერთი წახნაგის ზედაპირის ფართს, ხოლო b_i ელემენტარული პარალელებიპედის სიმაღლის შებრუნებულ სიდიდეს.

(1.17) თანაფარდობიდან ვღებულობთ:

$$a_i b_k = \delta_{ik},$$

სადაც

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 0, & \text{როცა } i \neq k \\ 1, & \text{,, } i = k. \end{cases} \quad (1.18)$$

ჩვენ შეგვიძლია ფორმალურად შევადგინოთ მესერი, რომლის ძირითადი პერიოდებია b_i სიდიდეები. ასეთ მესერს შებრუნებული მესერი ეწოდება.

(1.17) დამოკიდებულებათა საფუძველზე ადვილად შეიძლება ჩვენება იმისა, რომ ბრავეს მარტივი მესერის შებრუნებული მესერი არის იმავე სისტემის ბრავეს მესერი, მაგალითად: მარტივი კუბური სისტემის ბრავეს შებრუნებული მესერი არის ისევ კუბური სისტემის მესერი. წახნაგცენტრირებული ბრავეს მესერის (ტეტრაგონალური და კუბური) შებრუნებული მესერი არის მოცულობით ცენტრირებული მესერი იმავე სისტემისა. მოცულობით ცენტრირებული ბრავეს მესერის შებრუნებული მესერი არის წახნაგცენტრირებული მესერი იმავე სისტემისა. ტრიკლინური მესერის შებრუნებული მესერი ისევე ტრიკლინური სისტემის მესერია და ა. შ.

შებრუნებული მესერის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა არის

$$V' = (b_1 [b_2, b_3]),$$

თუ ამ უკანასკნელში შევიტანთ b_i მნიშვნელობებს (1.17) ფორმულის მიხედვით, მივიღებთ:

$$V' = \frac{1}{V}.$$

ე. ი. შებრუნებული მესერის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა უდრის პირდაპირი მესერის ელემენტარული უჯრედის მოცულობის შებრუნებულ სიდიდეს.

ატომურ მესერში მესერის ნებისმიერი კვანძის განმსაზღვრელი ვექტორია

$$r = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3, \quad (A)$$

ასევე შებრუნებულ მესერში

$$b = g_1 b_1 + g_2 b_2 + g_3 b_3. \quad (B)$$

თანახმად (A) და (B) დამოკიდებულებისა, მივიღებთ

$$(br) = n_1 g_1 + n_2 g_2 + n_3 g_3 = m = \text{const}, \quad (1.19)$$

სადაც m მთელი რიცხვია. (1.19) განსაზღვრავს მესერის კვანძურტილებში გამავალი სიბრტყის განტოლებას. შებრუნებული მესერის ყოველ ვექტორს ეთანადება g_1, g_2, g_3 -ს გარკვეული მნიშვნელობები, ამიტომ მოცემულ g_1, g_2, g_3 -თვის, თუ ჩავთვლით მიმდინარე კოორდინატებად μ_1, μ_2 და μ_3 სიდიდეებს, მივიღებთ პარალელური სიბრტყეების ოჯახს. g_1, g_2, g_3 ყოველთვის მარტივი რიცხვებია, რომელთაც საერთოდ გამყოფი არა აქვს. მართლაც, თუ g_1, g_2 და g_3 -ს აქვს საერთო გამყოფი, მაშინ ამ საერთო გამყოფზე შეკვეთით (1.19) სიბრტყის განტოლება აღარ შეიცვლება. ასეთ მარტივ $g_1 : g_2 : g_3 = h : k : l$ რიცხვებს მიღერის ინდექსები ეწოდება. ვინაიდან μ_1, μ_2, μ_3 კვანძებში გამავალი სიბრტყის მიმდინარე კოორდინატებია, ამიტომ თანახმად (1.19) ფორმულისა, კოორდინატთა ღერძებზე

ამ სიბრტყის მიერ მოცემული მონაკვეთები იქნებიან $\frac{m}{g_1}, \frac{m}{g_2}$ და $\frac{m}{g_3}$,

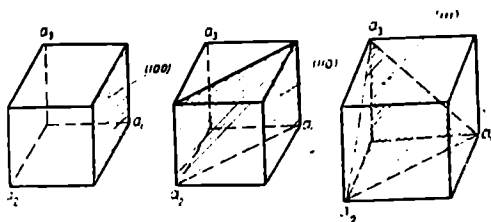
ე. ი. კოორდინატთა ღერძებზე სიბრტყის მონაკვეთები მიღერის ინდექსის შებრუნებული სიდიდის პროპორციული არიან.

ამრიგად, მიღერის ინდექსების საპოვნელად ვიქცევით შემდეგნაირად:

1) ვეძებთ აღებული სიბრტყის მიერ მოჭრილ მონაკვეთებს კოორდინატთა ღერძებზე და ამ სიდიდეებს ჩავწერთ a_1, a_2 და a_3 ერთეულებში.

2) ვადგენთ მიღებული რიცხვების შებრუნებულ სიდიდეებს, შემდეგ დაგვყავს უმცირეს ჯერად რიცხვებზე და მიღებულ რიცხვებს ჩავწერთ (hkl) -ს სახით, ესენი მიღერის ინდექსებია. მაგალითად: სიბრტყის გადაკვეთის წერტილები კოორდინატთა ღერძებზე არის (400), (010), (002), ანდა მოკლედ (4, 1, 2), მათი შებრუნებული სიდიდეებია $1/4, 1$ და $1/2$ ანდა $1/4, 4/4$ და $2/4$. მიღერის ინდექსებია (1, 4, 2).

თუ სიბრტყე მოცემულ ღერძს გადაკვეთს უსასრულობაში, მაშინ შესაბამისი მიღერის ინდექსი იქნება 0. თუ სიბრტყე ღერძს გადაკვეთს



ნახ. 8.

უარყოფითი მიმართულებით, მაშინ შესაბამისი მიღერის ინდექსი იქნება უარყოფითი, ამ შემთხვევაში უარყოფითი ნიშანი იწერება ინდექსის ზემოთ და არა წინ. ნახ. 8-ზე მოცემულია კუბური კრისტალის ძირითადი სიბრტყეების მიღერის ინდექსები.

კუბური კრისტალის ექვსივე სიბრტყის მიღერის ინდექსებია (100), (010), (100), (001), (010) და (001). ყველა ამ ეკვივალენტურ სიბრტყეებს აღნიშნავენ {100}. კრისტალში მიმართულებას აღნიშნავენ კვადრატული ფრჩხილით. მაგალითად, Ox ღერძის მიმართულებას აღნიშნავენ [100], ანალოგიურად Oy ღერძის მიმართულებას — [010] და Oz ღერძის მიმართულებას — [001]. დასასრულს დავამტკიცოთ შემდეგი ორი დებულება:

1. შებრუნებული მესერის ვექტორი b მართობია იმ სიბრტყისა, რომლის მიღერის ინდექსებია (hkl) . მართლაც $\frac{a_1}{h}$, $\frac{a_2}{k}$ და $\frac{a_3}{l}$ ვექტორების ბოლო წერტილები, ცხადია, იმყოფება (hkl) სიბრტყეზე. ამიტომ ამავე სიბრტყეზე იქნებიან მოთავსებულნი $\frac{a_1}{h} - \frac{a_2}{k}$ და $\frac{a_1}{h} - \frac{a_3}{l}$ ვექტორები.

ავიღოთ შებრუნებული მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორი

$$b = hb_1 + kb_2 + lb_3$$

($g_1 : g_2 : g_3 = h : k : l$) და შევადგინოთ სკალარული ნამრავლი

$$b \left(\frac{a_1}{h} - \frac{a_2}{k} \right) = (hb_1 + kb_2 + lb_3) \left(\frac{a_1}{h} - \frac{a_2}{k} \right) = 0$$

$$b \left(\frac{a_1}{h} - \frac{a_3}{l} \right) = (hb_1 + kb_2 + lb_3) \left(\frac{a_1}{h} - \frac{a_3}{l} \right) = 0.$$

ამრიგად, b ვექტორი მართობია (hkl) სიბრტყეზე აღებული $\frac{a_1}{h} - \frac{a_2}{k}$

და $\frac{a_1}{h} - \frac{a_3}{l}$ წრფეებისა, მაშასადამე, b მართობია (hkl) სიბრტყისა.

2. დავამტკიცოთ, რომ (hkl) სიბრტყეთა ოჯახში მეზობელ სიბრტყეებს შორის მანძილი უდრის $1/b_{hkl}$, მართლაც

$$br = br \cos \widehat{br} = b \cdot d = m.$$

მეზობელ სიბრტყეებს შორის მანძილი

$$d_{hkl} = \frac{m+1}{b_{hkl}} - \frac{m}{b_{hkl}} = \frac{1}{b_{hkl}}. \quad (1.20)$$

§ 6. რენტგენის სხივების დიფრაქცია კრისტალურებში

კრისტალების სტრუქტურის ექსპერიმენტული გამოკვლევებისათვის საჭიროა კრისტალზე ვიშოქმედოთ ისეთი ტალღებით, რომელთა სიგრძე ატომების გეომეტრიულ ზომაზე ($\sim 10^{-8}$ სმ) ბევრად ნაკლებია, ვინაიდან

მესერის ატომებთან ასეთი ტალღების მოქმედებას ექნება ძირითადად დიფრაქციული ხასიათი. ამ მიზნით შეიძლება გამოყენებული იქნეს ტალღები, რომლებიც დაკავშირებულია რენტგენის სხივებთან, ელექტრონებთან და ნეიტრონებთან, სათანადო ტალღის სიგრძე ენერგიასთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით:

$$\lambda = \frac{hc}{E}, \quad (1.21)$$

რენტგენის სხივებისათვის და

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2ME}} \quad (1.22)$$

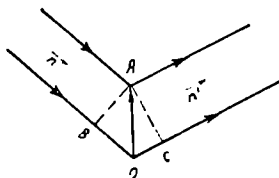
ნეიტრონებისა და ელექტრონებისათვის, სადაც E არის ენერგია, M —ნაწილაკის მასა.

თანახმად ამ დამოკიდებულებისა, 10^{-8} სმ რიგის ტალღის სიგრძის მისაღებად საჭიროა ენერგია: რენტგენის სხივებისათვის— 10^4 eV, ელექტრონებისათვის— 10^2 eV და ნეიტრონებისათვის— 10^{-1} eV.

ამ პარაგრაფში განხილული იქნება კრისტალის სტრუქტურის დადგენის ძირითადი პრინციპები, დამყარებული რენტგენის სხივების დიფრაქციაზე.

ა) ლაუეს დიფრაქციული პირობები. სიმარტივისათვის განვიხილოთ ორი ატომი, რომლებიც მოთავსებულია O და A კვანძებში და დაშორებულია ერთმანეთისაგან მესერის ტრანსლაციური პერიოდით a_1 (ნახ. 9).

თუ აღებულ ატომებზე ეცემა რენტგენის სხივთა კონა, რომელთა ტალღის სიგრძე $\lambda < 10^{-8}$ სმ, მაშინ მივიღებთ სხივთა დიფრაქციას—გაბნევას ყველა მიმართულებით. გაბნეულ სხივთა ინტერფერენცია გარკვეული მიმართულებით გვაძლევს ინტერფერენციულ მაქსიმუმებს ან მინიმუმებს. აღვნიშნოთ n და n' ერთეული სიგრძის ვექტორები, რომლებიც განსაზღვრავენ დაცემული და გაბნეული სხივების მიმართულებას, სათანადოდ. ცნობილია, რომ ინტერფერენციული მაქსიმუმები მიიღებიან იმ შემთხვევაში, როდესაც შესაყრებ სხივთა ფაზების სხვაობა უდრის მთელ რიცხვჯერ აღებულ 2π -ს, ანდა მათი გეომეტრიული სვლათა სხვაობა უდრის ტალღის სიგრძეს აღებულს მთელ რიცხვჯერ. თანახმად ნახ. 9-სა, n' მიმართულებით გაბნეული სხივების სვლათა სხვაობა იქნება



ნახ. 9.

$$Bo + oc = -na_1 + n'a_1 = (n' - n) a_1.$$

ამრიგად, აღნიშნული მიმართულებით ინტერფერენციული მაქსიმუმების მისაღებად საჭიროა

$$(n' - n) a_1 = g_1 \lambda, \quad (1.23)$$

სადაც g_1 მთელი რიცხვია, ანალოგიურად, სამგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში ინტერფერენციული მაქსიმუმების გაძლიერების პირობას წარმოადგენს განტოლებათა შემდეგი სისტემა:

$$\begin{aligned} (n' - n) a_1 &= g_1 \lambda \\ (n' - n) a_2 &= g_2 \lambda \\ (n' - n) a_3 &= g_3 \lambda, \end{aligned} \quad (1.24)$$

სადაც g_1, g_2 და g_3 მთელი რიცხვებია, a_1, a_2 და a_3 მესერის ძირითადი პერიოდებია. განტოლებათა (1.24) სისტემას უწოდებენ ლაუეს ინტერფერენციულ პირობას. თუ განტოლებათა (1.24) სისტემას შევადარებთ (1.15) განტოლებებს, შებრუნებული მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორისათვის მივიღებთ

$$b = \frac{n'}{\lambda} - \frac{n}{\lambda}. \quad (1.25)$$

ამრიგად, პირობა (1.25) წარმოადგენს ლაუეს ინტერფერენციული პირობის (1.24) ეკვივალენტურ პირობას, თუ შემოვიტანთ ტალღურ ვექტორს

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} n.$$

მაშინ (1.25) პირობა მიიღებს შემდეგ სახეს

$$k' - k = 2\pi b. \quad (1.26)$$

ვინაიდან $|k'| = |k|$, ამიტომ

$$k^2 = k'^2 = k^2 + 4\pi^2 b^2 + 2\pi (bk).$$

აქედან

$$\pi b^2 + (bk) = 0,$$

ანდა

$$(\pi b + k) \cdot b = 0. \quad (1.27)$$

ამრიგად, (1.24), (1.25) და (1.26) ანდა (1.27) დამოკიდებულებები წარმოადგენენ ლაუეს ინტერფერენციული პირობის ეკვივალენტურ განტოლებებს.

განვიხილოთ ლაუეს ინტერფერენციული პირობის გეომეტრიული ინტერპრეტაცია შებრუნებული მესერის სივრცეში. ამისათვის შებრუნებული მესერის რომელიმე კვანძიერტილი, მაგ., 0 წერტილი ავიღოთ საწყის წერტილად და გავავლოთ მასზე $k/2\pi$ ვექტორი (ნახ. 10). R წერტილზე

შემოეწეროთ $k/2\pi$ რადიუსის სფერო, მას ევალდის სფეროს უწოდებენ. ვთქვათ, სფეროს ზედაპირის მახლობლად აღმოჩნდა შებრუნებული მესერის რომელიმე S კვანძი, მაშინ RS მონაკვეთი იქნება გაბნეული სხივის ტალღური ვექტორი $k'/2\pi$, რომელიც შეესაბამება ინტერფერენციულ გაძლიერებას. მართლაც, ვინაიდან OS არის მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორი $\mathbf{b}$, ამიტომ, თანახმად ნახ. 10-სა, გვექნება

$$k' - k = 2\pi \mathbf{b}.$$

ეს კი წარმოადგენს ლაუეს ინტერფერენციულ პირობას. ამრიგად, დაცემული სხივების ყოველ მიმართულებას, ანდა k -ს ყოველ შესაძლო მნიშვნელობას, ევალდის სფეროს დახმარებით შეიძლება მოვეძებნოთ ის მიმართულებები, ანდა k -ს ის მნიშვნელობები, რომლებიც ეთანადებიან ინტერფერენციულ მაქსიმუმებს.

ბ) ბრეგი-ვულფის პირობა. ლაუეს ინტერფერენციულ პირობას შეიძლება მივცეთ სხვა სახე. ამისათვის R წერტილზე გავატაროთ $OS = \mathbf{b}$ ვექტორის მართობულად pp სიბრტყე (ნახ. 10). წინა პარაგრაფიდან ცნობილია, რომ $\mathbf{b}$ ვექტორის მართობი სიბრტყე წარმოადგენს ატომური მესერის კვანძებში გამავალ სიბრტყეს, რომლის მიღერის ინდექსებია $(h \ k \ l)$, ამასთან $h : k : l = g_1 : g_2 : g_3$. თუ მათ საერთო მამრავლს აღვნიშნავთ n -ით, მაშინ

$$\mathbf{b} = n \cdot \mathbf{b}_{hkl}.$$

მეორე მხრივ, შეზობელ $(h \ k \ l)$ სიბრტყეებს შორის მანძილი

$$d = \frac{1}{b_{hkl}} = \frac{n}{b}.$$

თანახმად ნახ. 10-ისა

$$OS = 2R \sin \theta = 2 \cdot \frac{k}{2\pi} \sin \theta = \frac{2}{\lambda} \sin \theta.$$

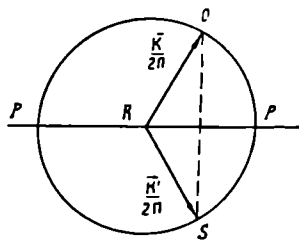
მეორე მხრივ

$$OS = |\mathbf{b}| = n \cdot b_{hkl} = \frac{2}{\lambda} \sin \theta.$$

აქედან

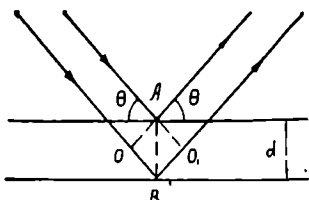
$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (1.28)$$

ამ ფორმულას უწოდებენ ბრეგი-ვულფის ინტერფერენციულ პირობას, რომელიც უშუალოდ მიიღება ლაუეს ინტერფერენციული პირობიდან. ამიტომ იგი მისი ეკვივალენტურია. $k'/2\pi$ ვექტორი წარმოადგენს $k/2\pi$



ნახ. 10.

მექტორის სარკულ არეკვლას ატომური სიბრტყიდან, რომლის მიღერის ინდექსებია (hkl). სხვანაირად რომ ვთქვათ, ბრეგის პირობა გვაძლევს ინტერფერენციულ მაქსიმუმებს მეზობელი ატომური სიბრტყეებიდან გაბნეული სხივებისა. ნახ. 11-ზე ნაჩვენებია ორი მეზობელი ატომური სიბრტყე, რომლებიც ერთმეორისაგან დაშორებულია d მანძილით. აგრეთვე



ნახ. 11.

ნაჩვენებია პარალელურ სხივთა კონა, რომელიც ეცემა მესერს θ კუთხით, იქვე, მესერის A და B კვანძურტილებიდან იმავე კუთხით გაბნეულია სხივთა კონა, აღნიშნული სხივების სვლათა სხვაობა უდრის

$$OB + O'B = 2d \sin \theta.$$

ეს სხივები გვაძლევს ინტერფერენციულ მაქსიმუმს, როდესაც

$$2d \sin \theta = n\lambda.$$

რაც ემთხვევა (1.28) ფორმულას.

ამრიგად, ბრეგის ფორმულა წარმოადგენს კრისტალის ძირითადი თვისებების — პერიოდული სტრუქტურის უშუალო შედეგს.

§ 7. ძრისტალში ნაწილატთა ურთიერთქმედების ძალეების დასახინათება

მყარ სხეულებში ნაწილაკები გარკვეულ წონასწორულ მდგომარეობას იკავებენ. ეს გარემოება მივეითებებს იმაზე, რომ ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედებას აქვს როგორც განზიდვის, ისე მიზიდვის ხასიათი. წონასწორობის მდგომარეობაში ეს ძალები ერთმანეთს აბათილებენ. როდესაც ნაწილაკებს შორის მანძილი წონასწორულზე მეტია, მაშინ ნაწილაკებს შორის მიზიდვა სკარბობს განზიდვას და პირიქით, როდესაც ნაწილაკებს შორის მანძილი წონასწორულზე ნაკლებია — განზიდვა სკარბობს მიზიდვას.

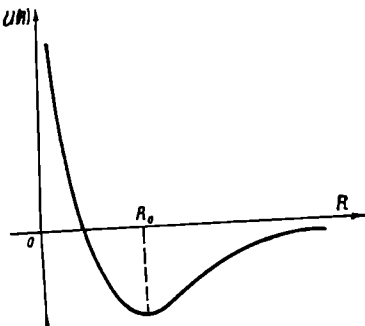
ნახ. 12-ზე ნაჩვენებია ორ ნაწილაკს შორის ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგიის მრუდი როგორც ატომებს შორის მანძილის ფუნქცია. ნაწილაკზე მოქმედი ძალა წონასწორობის წერტილში ნულის ტოლია

$$\left(\frac{\partial U}{\partial R} \right) = 0, \text{ როდესაც } R = R_0.$$

$$R > R_0, \frac{\partial U}{\partial R} > 0 \text{ — ეთანადება მიზიდვა}$$

$$R < R_0, \frac{\partial U}{\partial R} < 0 \text{ — ეთანადება განზიდვა}$$

ნაწილაკებს შორის ასეთი სახის ურთიერთქმედება შეიძლება გაგებული იქნეს დადებითი და უარყოფითი მუხტების იმ ურთიერთქმედებით, რომლისგანაც შედგება ყოველი ნაწილაკი. ნაწილაკთა შორის ურთიერთქმედების ძალების ტიპის მიხედვით კრისტალები იყოფა ოთხ ჯგუფად: იონური, ვალენტური, მეტალური და მოლეკულური კრისტალები. ქვემოთ მოყვანილია ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების ძალების დახასიათება და სათანადო კრისტალების ენერგიის გამოთვლა. კრისტალის ენერგიაში იგულისხმება ენერგიის ის რაოდენობა, რომელიც საჭიროა კრისტალის შემადგენელი ნაწილაკების დასაშორებლად ერთმანეთისაგან უსასრულო მანძილებზე.

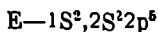
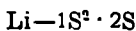


ნახ. 12.

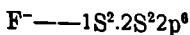
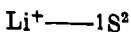
ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების ძალების ყველაზე მარტივ სურათი გვაქვს იონურ კრისტალებში, ამიტომ უპირველეს ყოვლისა დავაწყებთ იონური კრისტალების განხილვით.

1. იონური კრისტალები. როგორც სახელწოდება გვიჩვენებს, იონური კრისტალები შედგებიან დადებითი და უარყოფითი იონებისაგან, ისინი მიიღებიან ტუტე მეტალებისა Na, K, Rb... და ჰალოიდების Br, Cl, J, F...შეერთებით. ტუტე მეტალის ატომებს აქვთ ერთი სავალენტო ელექტრონი, ხოლო ჰალოიდებს აკლიათ ერთი ელექტრონი მათი ელექტრონული გარსის შესავსებად. როდესაც ტუტე მეტალის ატომები უერთდება ჰალოიდებს, ტუტე მეტალის სავალენტო ელექტრონი გადადის ჰალოიდის ატომებზე და ამრიგად მიიღება მეტალის დადებითი და ჰალოიდის უარყოფითი იონი, რომელთა ელექტრონული კონფიგურაცია, მსგავსად იშვიათი ელემენტების ატომებისა, მთლიანად შეესებულება. მაგალითად, განვიხილოთ კრისტალი LiF.

Li და F-ის ატომების ელექტრონული კონფიგურაციაა

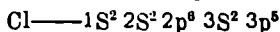
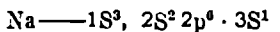


LiF კრისტალის შემადგენელი ნაწილაკებია Li^+ და F^- იონები, რომელთა ელექტრონული კონფიგურაციაა

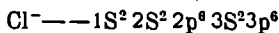
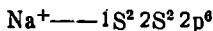


პიოველი არის პელიუმის, ხოლო მეორე—ნეონის ატომის ელექტრონული კონფიგურაცია.

კრისტალი NaCl შედგება Na^+ და Cl^- იონებისაგან. Na და Cl-ის ატომები ელექტრონული კონფიგურაცია



Na^+ და Cl^- იონების ელექტრონული კონფიგურაცია



პირველი არის ნეონის, ხოლო მეორე—არგონის ატომების ელექტრონული კონფიგურაცია. ანალოგიურ მდგომარეობას აქვს ადგილი დანარჩენი იონური კრისტალებისათვის. ის გარემოება, რომ იონური კრისტალები შედგებიან დადებითი და უარყოფითი იონებისაგან, აიხსნება იმით, რომ ახლო მანძილებზე (რომელიც ეთანადება ატომებს შორის მანძილს მყარ მდგომარეობაში) ენერგეტიკულად ხელსაყრელია სისტემა შედგებოდეს დადებითი და უარყოფითი იონებისაგან. მართლაც, განვიხილოთ კრისტალი NaCl.

ცნობილია, რომ Na-ის სავალენტო ელექტრონის იონიზაციისათვის საჭიროა 5,2 eV ენერგიის დახარჯვა, ხოლო როდესაც Cl-ის ატომი იერთებს ერთ ელექტრონს, გამოიყოფა 3,8 eV ენერგია. ამრიგად, Na-ის ატომიდან Cl-ის ატომზე რომ გადაეიტანოთ ერთი ელექტრონი, საჭიროა $5,2 - 3,8 = 1,4 \text{ eV}$ ენერგიის დახარჯვა, მეორე მხრივ, დადებით და უარყოფით იონებს შორის ელექტროსტატიკური მიზიდვის კულონური ენერგია იძლევა ენერგიის მნიშვნელოვან მოგებას

$$U_{\text{ელ.სტ.}} = -\frac{e^2}{r} = -5 \text{ eV} \quad (r \sim 3\text{\AA} \text{ მანძილზე})$$

ამიტომ ენერგეტიკული თვალსაზრისით, უფრო ხელსაყრელია გვექონდეს Na^+ და Cl^- იონებისაგან შემდგარი სისტემა ახლო მანძილზე. ვინაიდან იონური კრისტალების შემადგენელი ნაწილაკების ელექტრონული კონფიგურაცია მთლიანად შეესაბამება, მათი ელექტრონული მუხტების განაწილებას ექნება სფერული სიმეტრია, რომელთა ურთიერთქმედება საკმარისად დიდი სიზუსტით შეიძლება აიწეროს კულონის კანონით. ამიტომ იონური კრისტალების ენერგია ძირითადად კულონურია.

ა) იონური კრისტალების ენერგია

იონური კრისტალების კლასიკური თეორია შემუშავებულ იქნა ბორისა და მადელუნგის მიერ. ამ თეორიის ძირითად გამოსავალ წერტილს შეადგენდა ორი დაშვება.

1) იოხური კრისტალები შედგებიან დადებითი და უარყოფითი იონებისაგან და 2) იონების ელექტრული მუხტების განაწილებას აქვს სფერული სიმეტრია, რომელთა შორის ურთიერთქმედება ელექტროსტატიკური ხასიათისაა და აიწერება საკმარისი სიზუსტით კულონის კანონით. იონების გარკვეულ მანძილებზე დაახლოებისას მათ შორის წარმოიშობიან ძლიერი განზიდვის ძალები, რომელთა ბუნება არაელექტროსტატიკურია. ამ ძალების ბუნების შესახებ თეორიაში მიღებული იყო მრავალი დაშვება, რომლებზედაც მოკლედ ლაპარაკი გვექნება ქვემოთ. განვიხილოთ კრისტალი NaCl . თუ აღვნიშნავთ i და j იონის ურთიერთქმედების ენერგიას φ_{ij} -ით, მაშინ i -ური იონის სრული ენერგია იქნება:

$$\varphi_i = \sum_j \varphi_{ij}, \quad (1.29)$$

სადაც Σ' აღნიშნავს იმას, რომ აღნიშნულ ჯამში გამოორიცხულია $i=j$. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, შორ მანძილზე იონებს შორის ურთიერთქმედება ძირითადად ელექტროსტატიკურია, რომელიც აიწერება კულონის კანონით $\left(\pm \frac{e^2}{r}\right)$, ხოლო ახლო მანძილებზე გადადის განზიდვაში, რომელიც წარმოდგენილი იყო λ/r^{μ} —სახით. ამრიგად

$$\varphi_{ij} = \frac{\lambda}{r_{ij}^{\mu}} \pm \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (1.30)$$

სადაც ნიშანი (+) იწერება ერთნაირი ნიშნის, ხოლო ნიშანი (—) სხვადასხვა ნიშნის იონებისათვის. (1.30) ფორმულაში შემავალი მუდმივები λ და μ ჯერჯერობით უცნობია. მათი რიცხვითი მნიშვნელობის მოძებნისათვის საკმარისია ორი პირობის გამოყენება, რომელიც მოცემული იქნება ქვემოთ. ვინაიდან (1.29) ფორმულაში აჯამება წარმოებს ყველა წყვილის მიმართ, რომელსაც ადგენს მოცემული i -ური იონი ყველა სხვა იონთან, ამიტომ აჯამვის შედეგი არ იქნება დამოკიდებული, თუ სად იმყოფება მოცემული იონი სხეულის შიგნით (მხოლოდ, თუ ეს იონი სხეულის ზედაპირზე არ იმყოფება). ასევე აჯამვის შედეგი არ იქნება დამოკიდებული i -ური იონის ნიშანზედაც, ამიტომ ნიშანი „ i “ შეიძლება არ მივუწეროთ ფ-ს. ამრიგად, თუ ზედაპირულ ფექტს უგულებელვყოფთ, მაშინ კრისტალის სრული ენერგია

$$U = N\varphi, \quad (1.31)$$

სადაც N არის ერთი ნიშნის იონთა რიცხვი. თუ მეზობელ იონებს შორის მანძილს აღვნიშნავთ R -ით, მაშინ $r_{ij} = p_{ij}R$, სადაც p_{ij} რიცხვები განსაზღვრავენ i და j იონის კოორდინატებს აღებულს მესერის პარამეტრებში ($a_1 = a_2 = a_3 = R$), ამრიგად

$$\varphi = \sum_i' \varphi_{ij} = \frac{\lambda A_n}{R^n} - \frac{\alpha e^2}{R}, \quad (1.32)$$

სადაც

$$A = \sum_i' p_i \bar{i}^n \quad \text{და} \quad \alpha = \sum_i' (\pm) p_i \bar{i}^1 \quad (1.33)$$

ნიშანი (—) უნდა იქნეს აღებული, თუ იონებს სხვადასხვა ნიშანი აქვთ, ხოლო ნიშანი (+), თუ იონებს ერთნაირი ნიშანი აქვთ. α -ს ეწოდება მაღელუნგის მუდმივა, იგი წარმოადგენს ძირითად პარამეტრს მოცემული კრისტალისათვის. მისი გამოთვლა მოცემულია ქვემოთ. ხოლო რაც შეეხება A_n სიდიდეს, იგი უშუალოდ მოინახება (1.33) ფორმულიდან კრისტალის სტრუქტურის გამოყენებით. რომ განესაზღვროთ λ და n მუდმივები, ამისათვის გამოვიყენოთ შემდეგი ორი პირობა:

ა) რადგანაც ჩვენ ვიხილავთ კრისტალის წონასწორობის მდგომარეობას, ამიტომ ენერგიას მინიმალური მნიშვნელობა უნდა ჰქონდეს, ე. ი.

$$\frac{\partial U}{\partial R} = N \frac{\partial \varphi}{\partial R} = 0, \quad \text{როდესაც} \quad R = R_0,$$

სადაც R_0 არის მეზობელ იონებს შორის წონასწორობის მანძილი. თანახმად (1.32) ფორმულისა,

$$-\frac{n\lambda A_n}{R_0^{n+1}} + \frac{\alpha e^2}{R_0^2} = 0$$

აქედან

$$\lambda A_n = \alpha e^2 \cdot \frac{R_0^{n-1}}{n}. \quad (1.34)$$

თუ ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (1.31) ფორმულაში, მივიღებთ:

$$U = U_0 = -\frac{N\alpha e^2}{R_0} \cdot \left(1 - \frac{1}{n}\right). \quad (1.35)$$

ბ) იმისათვის, რომ მიახლოებით განესაზღვროთ n -ის მნიშვნელობა გამოვიყენოთ შეკუმშვის კოეფიციენტის ექსპერიმენტული მნიშვნელობა. შეკუმშვის კოეფიციენტი

$$k = -\frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{dp}.$$

მეორე მხრივ, თანახმად თერმოდინამიკის 1 კანონისა,

$$dU = -p dV,$$

აქედან

$$\frac{dp}{dV} = -\frac{d^2 U}{dV^2}.$$

ამოთხ. k dV^2

NaCl კრისტალის შემთხვევაში $V=2NR^3$, ამიტომ

$$\frac{dU}{dV} = \frac{dU}{dR} \cdot \frac{dR}{dV} \quad (1.36)$$

$$\frac{d^2U}{dV^2} = \frac{dU}{dR} \cdot \frac{d^2R}{dV^2} + \frac{d^2U}{dR^2} \cdot \left(\frac{dR}{dV}\right)^2$$

წონასწორობის დროს

$$\left(\frac{dU}{dR}\right)_{R_0} = 0.$$

ამიტომ

$$\frac{1}{k} = \left(V \frac{d^2U}{dV^2}\right)_{R_0} = \left(V \cdot \frac{d^2U}{dR^2} \left(\frac{dR}{dV}\right)^2\right)_{R_0},$$

მაგრამ

$$\frac{dR}{dV} = \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{NR^2},$$

ამიტომ

$$\frac{d^2U}{dR^2} = N \left[\frac{n(n+1)\lambda A_n}{R^{n+2}} - \frac{\alpha e^2}{R^3} \right].$$

წონასწორობის მდგომარეობაში

$$\lambda A_n = \alpha e^2 \cdot \frac{R_0^{n-1}}{n},$$

ამიტომ

$$V \frac{d^2U}{dR^2} = \frac{(n-1)\alpha e^2}{18 \cdot R_0^4}.$$

ამ მნიშვნელობათა ჩასმა (1,36) გამოსახულებაში გვაძლევს:

$$\frac{1}{k} = \frac{(n-1)\alpha e^2}{18 R_0^4}.$$

აქედან

$$n = 1 + \frac{18 R_0^4}{k \cdot \alpha e^2} \quad (1.37)$$

თუ k -თვის ავიღებთ შეკუმშვის კოეფიციენტის ექსპერიმენტულ მნიშვნელობას და α -ს გამოვთვლით თეორიული გზით, მაშინ (1.37) ფორმულის მიხედვით გავიგებთ n -ს. გამოთვლები და მიღებული ენერგიის ცდებ-

თან შედარება გვიჩვენებს, რომ $n \sim 10$ -ის ტოლია. I ცხრილში მოცემულია რამდენიმე კრისტალისათვის n -ის რიცხვითი მნიშვნელობები, რომელიც მიღებული იქნა თეორიულად გამოთვლილი ენერგიის (1.35) ექსპერიმენტულ მნიშვნელობასთან შედარებით. ამ ცხრილის მიხედვით n ცოტათი ნაკლებია 9-ზე მსუბუქი იონებისათვის და ცოტათი მეტია 9-ზე მძიმე იონებისათვის.

ცხრილი I

n	LiF	LiCl	LiBr	NaCl
	5,9	8,0	8,7	9,1

ზემოთ ჩვენ განვიდგის ძალებისათვის ავიღეთ r^{-n} კანონი, მაგრამ იონების ურთიერთქმედების კვანტურ-მექანიკურმა განხილვამ გვიჩვენა,

რომ განვიდგის ძალებისათვის უფრო ზუსტია $\sim e^{-r/a}$ კანონი. ამ კანონის მიხედვით იქნა გათვლილი იონური კრისტალების ენერგია, მაგრამ სათანადო შესწორება უმნიშვნელო აღმოჩნდა.

ბორნის ზემოთ მოყვანილი თეორიის გამოქვეყნების შემდეგ სხვადასხვა ავტორების მიერ შეტანილ იქნა მრავალი შესწორება. მაგალითად, გათვალისწინებულ იქნა მულტიპოლური ურთიერთქმედება, ნულოვანი ენერგია და სხვა. მაგრამ, ყველა ეს შესწორებები უმნიშვნელო აღმოჩნდა ელექტროსტატიკურ ენერგიასთან შედარებით, რომელიც შეადგენს კრისტალის სრული ენერგიის $85 \div 90\%$, დანარჩენი კი გამოწვეულია არაელექტროსტატიკური (არაკულონური) ძალებით.

ბ) მადელუნგის მუდმივის გამოთვლა ივენის მეთოდით

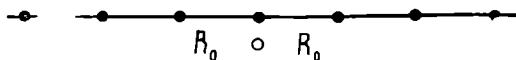
არსებობს მადელუნგის მუდმივის გამოთვლის მრავალი მეთოდი, მათ შორის ყველაზე მარტივია ივენის მეთოდი, რომელსაც ქვემოთ განვიხილავთ:

$$\alpha = \sum' (\pm) p_{ij}^{-1}, \quad (1.38)$$

ანღა

$$\frac{\alpha}{R_0} = \sum' (\pm) \frac{1}{r_{ij}},$$

სადაც $r_{ij} = R p_{ij}$ არის მანძილი საწყისი იონიდან j იონამდე. სიმარტვისათვის ჭერ განვიხილოთ ერთგანზომილებიანი შემთხვევა (ნახ. 13).



ნახ. 13.

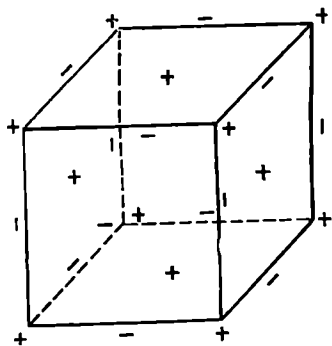
$$\frac{\alpha}{R_0} = \frac{2}{R_0} \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots \right).$$

ამრიგად

$$\alpha = 2 \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots \right) = 2 \cdot \ln 2.$$

სამგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში გამოთვლები შედარებით რთულია. სირთულე დაკავშირებულია ძირითადად იმასთან, რომ (1.38) ჯამი ნიშანცვლადია, ამიტომ საკმარისი სიზუსტის მისაღწევად საჭიროა წევრთა ძალიან დიდი რაოდენობის აღება. ივენის მეთოდი საშუალებას იძლევა (1.38) მწკრივის წევრები დავალაგოთ ისეთი მიმდევრობით, რომ მიღებული მწკრივი გახდეს სწრაფად კრებადი. ამ მეთოდის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ კონკრეტული კრისტალი, მაგალითად NaCl .

ცენტრალურ იონად ავიღოთ უარყოფითი იონი და მის გარშემო მდებარე იონები დავაჯგუფოთ შემდეგნაირად: პირველ ჯგუფს მივაკუთვნოთ ის იონები, რომლებიც მდებარეობენ პირველი უახლოესი კუბის ზედაპირზე, მეორე ჯგუფს კი იონები, რომლებიც მდებარეობენ მომდევნო კუბის ზედაპირზე, და ა. შ. (ნახ. 14).



ნახ. 14.

I კუბის წახნაგებზე გვაქვს: 6 დადებითი, იონი, რომელიც ცენტრალური იონიდან დაშორებულია R_0 მანძილით (ეს იონები მდებარეობენ წახნაგთა შუა წერტილებში); 8—დადებითი იონი, რომელიც ცენტრალური იონიდან დაშორებულია $R_0\sqrt{3}$ მანძილით (ეს იონები მდებარეობენ კუბის წვეროებზე). 12—უარყოფითი იონი, რომლებიც დაშორებულია ცენტრალური იონიდან $R_0\sqrt{2}$ მანძილით (ეს იონები მდებარეობენ წიბოების შუა წერტილებში).

ამრიგად, პირველ კუბში მოთავსებული იონების წვლილი (1.38) ჯამში იქნება

$$\alpha = \frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}}.$$

II კუბის წახნაგებზე გვაქვს:

6 უარყოფითი იონი დაშორებული $2R_0$ მანძილით

24 დადებითი " " $\sqrt{5} R_0$ "

24 უარყოფითი " " $\sqrt{6} R_0$ "

12 " " $\sqrt{8} R_0$ "

24 დადებითი იონი დაშორებული $\sqrt{9} R_0$ მანძილით

8 უარყოფითი " " $\sqrt{12} R_0$ "

ამრიგად, I და II კუბის ზედაპირზე მდებარე იონების წვლილი (1.38) ჯამში შეადგენს

$$\alpha = \left(\frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} \right) + \left(-\frac{6}{2} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \frac{24}{\sqrt{6}} - \frac{12}{\sqrt{8}} + \frac{24}{\sqrt{9}} - \frac{8}{\sqrt{12}} \right).$$

ანალოგიურად გამოითვლება შემდეგი კუბის ზედაპირზე მდებარე იონების წვლილი (1.38) ჯამში. ამრიგად, მიიღება ნიშანცვლადი მწკრივი, რომლის კრებადობაზე არაფრის თქმა არ შეიძლება. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ივენმა მწკრივის წევრები ისეთნაირად დაალაგა, რომ მწკრივი სწრაფადკრებადი გახდა. ივენის მეთოდის შინაარსი მდგომარეობს შემდეგში: იონი, რომელიც პირველი კუბის შიგნით მდებარეობს, მთლიანად მას მიაკუთვნა. იონი, რომელიც წვეროზე მდებარეობს, მისი ერთი მერვედი აღებულ კუბს მიაკუთვნა, ხოლო 7/8 ნაწილი—მომდევნო კუბს. იონი, რომელიც წახნაგზე მდებარეობს, ნახევარი აღებულ კუბს მიაკუთვნა, მეორე ნახევარი—მომდევნო კუბს. იონი, რომელიც წიბოზე მდებარეობს 1/4 აღებულ კუბს მიაკუთვნა, 3/4 კი—მომდევნო კუბს.

ამრიგად პირველი კუბის წვლილი წარმოიდგინება ასე:

$$\left(\frac{6 \cdot \frac{1}{2}}{1} - \frac{12 \cdot \frac{1}{4}}{\sqrt{2}} + \frac{8 \cdot \frac{1}{8}}{\sqrt{3}} \right) + \left(\frac{6 \cdot \frac{1}{2}}{1} - \frac{12 \cdot \frac{3}{4}}{\sqrt{2}} + \frac{8 \cdot \frac{7}{8}}{\sqrt{3}} \right).$$

პირველ ფრჩხილში მოთავსებული წევრები შეადგენენ I კუბის შიდა ნაწილს, ხოლო მეორე ფრჩხილში მოთავსებული წევრები—პირველი კუბის გარე ნაწილს. ასევე II კუბის წვლილი დაჰყო ორ ნაწილად: II კუბის შიდა და გარე ნაწილებად:

$$\left(-\frac{6 \cdot \frac{1}{2}}{2} + \frac{24 \cdot \frac{1}{2}}{\sqrt{5}} - \frac{24 \cdot \frac{1}{4}}{\sqrt{6}} + \frac{24 \cdot \frac{1}{4}}{\sqrt{9}} - \frac{8 \cdot \frac{1}{2}}{\sqrt{12}} \right) + \left(-\frac{6 \cdot \frac{1}{2}}{2} + \frac{24 \cdot \frac{1}{2}}{\sqrt{5}} - \frac{24 \cdot \frac{3}{4}}{\sqrt{6}} + \frac{24 \cdot \frac{3}{4}}{\sqrt{9}} - \frac{8 \cdot \frac{7}{8}}{\sqrt{12}} \right).$$

და ა. შ.

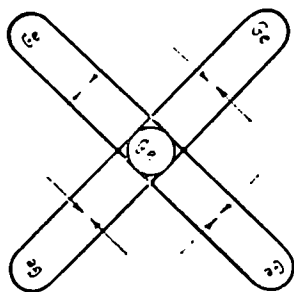
ცხადია. მწკრივის წევრების ასეთნაირი დაყოფა სრულიად ტრივიალურია. ივენმა ზემოთ მოყვანილი მწკრივის წევრები შემდეგი სახით წარმოადგინა:

$\alpha = (I \text{ კუბის შიდა ნაწილი}) + (I \text{ კუბის გარე ნაწილი} + II \text{ კუბის შიდა ნაწილი}) +$
 $+ (II \text{ კუბის გარე ნაწილი} + III \text{ კუბის შიდა ნაწილი}) + \dots = 1,4 + 0,3 + \dots$

როგორც ვხედავთ, ასეთნაირად დალაგებული მჭკრივის პირველი ორი წვერი იძლევა მადელუნგის მუდმივას საკმარისად კარგი სიზუსტით.

არსებობს აგრეთვე მადელუნგის მუდმივის გამოთვლის სხვა მეთოდები, რომლებზედაც ჩვენ აქ არ შევჩერდებით.

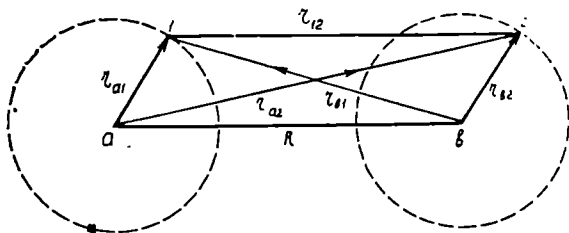
2. ვალენტური კრისტალები. იონურ კრისტალებში საკმარისად დიდი მიახლოებით სავალენტო ელექტრონი დაბმულია მოცემულ ატომთან. ვალენტურ კრისტალებში კი სავალენტო ელექტრონი საერთოა ურთიერთ-მოქმედი ატომებისათვის, ე. ი. სავალენტო ელექტრონი მოძრაობს ორივე ატომის დადებითი ბირთვის ირგვლივ და ქმნის ე. წ. ვალენტურ ბმას. ვალენტური ბმა მაქსიმალურია იმ შემთხვევაში, როდესაც ამ ბმას აწარმოებს ორი ელექტრონი (თითოეული თითო ატომიდან) ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულების სპინებით. ამ შემთხვევაში ელექტრონი მუხტების მაქსიმალური სიმკვრივე გვექნება ატომებს შორის შუა ადგილზე და გარდა ამისა, ბმას ახასიათებს გარკვეული მიმართულება. ვალენტური ბმის უმარტივეს მაგალითს წარმოადგენს წყალბადის მოლეკულა H_2 . ვალენტური ბმა იძლევა გარკვეულ დასაბუთებას იმისა, თუ წყალბადის ატომს რატომ არ შეუძლია მიიერთოს მესამე ატომი. ანალოგიურად ნახშირბადის, გერმანიუმის, სილიციუმის და ა. შ. ატომები წარმოადგენენ ტეტრაგონალური ვალენტური ბმის მაგალითს. აღნიშნულ ატომებს მეზობლად აქვთ 4 ასეთივე ატომი. ყოველი ორი ატომი ურთიერთქმედებს ვალენტური ბმით, რომელიც განხორციელებულია ორ-ორი ელექტრონით საწინააღმდეგო სპინებით, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 15-ზე. ამ შემთხვევაში ატომებს შორის ბმა გაჭერებულია. ამრიგად, ვალენტური ნაწერი ბმა იძლევა ვალენტუნების დასაბუთებას. თუ იონურ და ვალენტურ კრისტალებს განვიხილავთ როგორც კიდურ შემთხვევას, მაშინ მათ შორის მოთავსდებიან მთელი რიგი კრისტალები, რომლებსაც ექნებათ შორისული



ნახ. 15.

მდგომარეობა, ე. ი. ასეთ კრისტალებში ბმის გარკვეული ნაწილი მოდის ვალენტურ და ნაწილი კულონურ ბმაზე. თუ ატომების ელექტრონული კონფიგურაცია თითქმის შეესაბამება, ასეთ ატომებს შორის ბმა თითქმის კულონურია და პირიქით: თუ ატომების ელექტრონული კონფიგურაცია

საკმარისად შორსაა ინერტული გაზების კონფიგურაციასთან, მაშინ ასეთ ატომებს შორის ბმას ექნება მეტწილად ვალენტური ხასიათი. ვალენტური ბმის ინტერპრეტაცია კლასიკური ფიზიკის თვალსაზრისით შეუძლებელია. მისი გაგება მოხერხდა მხოლოდ ელექტრონთა სისტემის კვანტურ-მექანიკური აღწერით. სიმარტივისათვის განვიხილოთ წყალბადის მოლეკულა (ნახ. 16). კოორდინატთა ღერძები გავატაროთ ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 16-ზე. a და b წერტილებში მოთავსებულია წყალბადის ატომების სათანადო გულები, რომელთა შორის მანძილია R , r_{a1} და r_{b2} არის პირველი და მეორე ელექტრონების დაშორების მანძილი



ნახ. 16.

სათანადო გულებიდან. r_{12} არის პირველი და მეორე ელექტრონებს შორის მანძილი. r_{a2} და r_{b1} სათანადო მანძილებია პირველი ელექტრონიდან მეორე ბირთვამდე და მეორე ელექტრონიდან პირველ ბირთვამდე. როდესაც R ძალიან დიდია ატომის ზომასთან შედარებით, მაშინ ატომებს შორის ურთიერთქმედება შეიძლება უგულებელვუყუთ. ამ დროს პირველი ელექტრონი მუდამ a ბირთვის ირგვლივ მოძრაობს, ხოლო მეორე ელექტრონი b ბირთვის ირგვლივ. ორივე ატომი იმყოფება ძირითად $1S$ მდგომარეობაში, რომელიც აიწერება ტალღური ფუნქციებით

$$\psi_a(x_1 y_1 z_1) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \exp\left(-\frac{r_{a1}}{a_0}\right) = \psi_a(1) \quad (1.39)$$

$$\psi_b(x_2 y_2 z_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \cdot \exp\left(-\frac{r_{b2}}{a_0}\right) = \psi_b(2),$$

სადაც $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$ სმ — ბორის პირველი ორბიტის რადიუსია.

$\psi_a(1)$ და $\psi_b(2)$ — ტალღური ფუნქციები, რომლებიც აკმაყოფილებენ შრედინგერის შემდეგ განტოლებებს:

$$\begin{aligned} H_a^0 \psi_a(1) &= \epsilon_0 \psi_a(1) \\ H_b^0 \psi_b(2) &= \epsilon_0 \psi_b(2), \end{aligned} \quad (1.40)$$

სადაც $\epsilon_0 = -\frac{e^2}{2a_0}$ არის ელექტრონის ენერგია წყალბადის ატომის ძირითად მდგომარეობაში და

$$H_a^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{a1}} \quad (1.41)$$

$$H_b^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{b2}}$$

არაშეშფოთებული ოპერატორებია წყალბადის ატომისათვის. ატომების დაახლოების დროს მათ შორის წარმოიშობა ურთიერთქმედება, ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია იქნება

$$V(1,2) = \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}}. \quad (1.42)$$

აქ არ არის მხედველობაში მიღებული ორივე ატომის ბირთვების ურთიერთქმედება, იმის გამო, რომ 1 და 2 ელექტრონის მოძრაობის აღწერის დროს ბირთვები შეიძლება (ბირთვების დიდი მასის გამო ელექტრონის მასასთან შედარებით) უმოძრაოდ ჩავთვალოთ და მანძილი R მივიღოთ რაიმე პარამეტრად. ამ სისტემის შრედინგერის განტოლება ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$(H^0 + V) \psi(1, 2) = \epsilon \psi(1, 2) \quad (1.43)$$

სადაც $H^0 = H_a^0 + H_b^0$ — შეუშფოთებული სისტემის ენერგიის ოპერატორია, ϵ — ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობა და ψ — სათანადო ტალღური ფუნქცია.

აღვილი საჩვენებელია, რომ შეუშფოთებული სისტემისათვის

$$\psi^0(1, 2) = \psi_a^0(1) \psi_b^0(2) \text{ და } \epsilon = 2\epsilon_0 \quad (1.44)$$

თუ შეუშფოთებული სისტემის ენერგიის შესწორებას აღვნიშნავთ w -თი, ე. ი. $\epsilon = 2\epsilon_0 + w$, მაშინ, თანახმად შრედინგერის შეუშფოთების თეორიისა,

$$w = \int \psi_a^0 V \psi_b^0 d\tau. \quad (1.45)$$

ვინაიდან შეუშფოთებელ ენერგიას $2\epsilon_0$ -ს ეთანადება ორი სხვადასხვა ტალღური ფუნქცია, ამიტომ მდგომარეობა ორჯერადად გადაგვარებულია.

მართლაც, ელექტრონების განურჩევლობის გამო ტალღური ფუნქციები $\psi_a^0(1) \psi_b^0(2)$ და $\psi_b^0(2) \psi_a^0(1)$ წარმოადგენენ H^0 ოპერატორის საკუთარ ფუნქციებს $2\epsilon_0$ ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობისათვის. თანახმად შრედინგერის შეუშფოთების თეორიისა, ორჯერადად გადაგვარების შემთხვევაში საჭიროა ნულოვანი მიახლოების ფუნქციად აღებული იქნეს წარფივი კომბინაცია.

$$c_1 \psi_a^0(1) \psi_b^0(2) + c_2 \psi_b^0(2) \psi_a^0(1). \quad (1.46)$$

ზოგადი თეორიიდან გამომდინარეობს, რომ შესაძლებელია აღებულ იქნეს $\psi(1,2)$ ფუნქციების ორგვარი წრფივი კომბინაცია, რომელსაც ეთანადებიან სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ფუნქციები:

$$\begin{aligned}\psi_e(1,2) &= \psi_a^s(1)\psi_b^s(2) + \psi_a^s(2)\psi_b^s(1) \\ \psi_{ac}(1,2) &= \psi_a^s(1)\psi_b^s(2) - \psi_a^s(2)\psi_b^s(1).\end{aligned}\quad (1.47)$$

სიმეტრიული ფუნქციისათვის

$$\psi_e(1,2) = \psi_e(2,1) \quad (1.48)$$

ანტისიმეტრიული ფუნქციისათვის

$$\psi_{ac}(1,2) = -\psi_{ac}(2,1). \quad (1.49)$$

ელექტრონი ხასიათდება გარკვეული მიმართულების სპინით, ამიტომ ელექტრონთა სისტემის სრული ტალღური ფუნქცია უდრის კოორდინატული ტალღური ფუნქციისა და სპინური ფუნქციის ნამრავლს. ორი ელექტრონის შემთხვევაში სპინური ფუნქცია აგრეთვე შეიძლება შედგენილი იქნეს სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ფუნქციებით

$$\sigma_e(1,2) = \sigma_e(2,1) \quad (1.50)$$

და

$$\sigma_{ac}(1,2) = -\sigma_{ac}(2,1).$$

პაულის პრინციპიდან გამომდინარეობს, რომ სრული ტალღური ფუნქცია, რომელიც წარმოადგენს კოორდინატული და სპინური ფუნქციების ნამრავლს, ელექტრონთა სისტემისათვის უნდა იყოს ანტისიმეტრიული. ასეთი ანტისიმეტრიული სრული ფუნქცია შეიძლება შევადგინოთ ორე გზით:

$$\psi_e(1,2)\sigma_{ac}(1,2) \text{ და } \psi_{ac}(1,2)\sigma_e(1,2). \quad (1.51)$$

პირველი აგვიწერს სინგლეტურ მდგომარეობას ანტიპარალელური სპინებით, ე. ი. სპინთა ტოლქმედი $= 0$, მეორე — ტრიპლეტურ მდგომარეობას (პარალელური სპინებით). ნულოვანი მიახლოების ტალღური ფუნქციების შერჩევის შემდეგ გამოთვლები მიმდინარეობს შრედიנגერის შეშფოთების თეორიის მეთოდით. ეს გვაძლევს გადაგვარებული ღონის გახლეჩვას ორ ღონედ. ერთი ეთანადება $\psi_e(1,2)$ და მეორე — $\psi_{ac}(1,2)$ ფუნქციებს. საბოლოო შედეგი ასეთია

$$\epsilon = 2\epsilon_0 + \begin{cases} w_c \\ w_{ac} \end{cases}, \quad (1.52)$$

სადაც

$$w_c = \frac{k+A}{1+s^2}, \quad w_{ac} = \frac{k-A}{1-s^2}. \quad (1.53)$$

$$k = \int \psi_a^{(0)2}(1) \psi_b^{(0)2}(2) V(1,2) dr_1 dr_2$$

$$A = \int \psi_a^{(0)}(1) \psi_b^{(0)}(1) V(1,2) \psi_a^{(0)}(2) \psi_b^{(0)}(2) dr_1 dr_2 \quad (1.54)$$

$$s^2 = \int \psi_a^{(0)}(1) \psi_b^{(0)}(1) \psi_a^{(0)}(2) \psi_b^{(0)}(2) dr_1 dr_2.$$

ჩვენ ინტეგრალი, რომელსაც კულონურს უწოდებენ, წარმოადგენს ორი ატომის ელექტრონულ ღრუბელთა ელექტროსტატიკური ურთიერთქმედების ენერგიას, სადაც ელექტრონთა ღრუბლის სიმკვრივეა

$$e\psi_a^{(0)2}(2) \cdot \psi_b^{(0)2}(2).$$

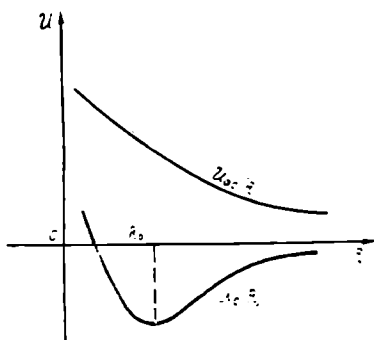
A ინტეგრალს არა აქვს კლასიკური ანალოგი, იგი წარმოიშობა ელექტრონთა კვანტურ-მექანიკური აღწერის გამო. მასში შედის ეგრეთ წოდებული გაცვლითი სიმკვრივე $e\psi_a^{(0)}(1) \cdot \psi_b^{(0)}(1)$ და $e\psi_a^{(0)}(2) \psi_b^{(0)}(2)$. ამიტომ ამ ინტეგრალს უწოდებენ გაცვლით ინტეგრალს. s წარმოადგენს ელექტრონების ტალღური ფუნქციების ერთმანეთთან გადაფარვის ზომას, როდესაც ატომები ერთმანეთისაგან დაშორებულია R მანძილით. ამრიგად, ელექტრონების ენერგია $E(R) = 2E_0 + w(R) = w(R) + \text{const}$ ასრულებს ატომების ურთიერთქმედების ენერგიის როლს.

მაშასადამე, წყალბადის ორი ატომის ურთიერთქმედების სრული ენერგია (რომელიც ამავე დროს შეიცავს განზიდვის ენერგიას), ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$U_c = \frac{e^2}{R} + w_c(R) - \text{სინგლეტურ მდგომარეობაში} \quad (1.55)$$

$$U_{ac} = \frac{e^2}{R} + w_{ac}(R) - \text{ტრიპლეტურ მდგომარეობაში} \quad (1.56)$$

პიტერმა და ჯონდონმა ჩაატარეს შერიცხვითი გამოთვლები ზემოთ ზღნიშნული ინტეგრალებისა და მიიღეს $U_c(R)$ და $U_{ac}(R)$ -ის ანალიზური სახე, რომელიც ნაჩვენებია ნახ. 17-ზე. ამრიგად, წყალბადის ორი ატომი იძლევა წყალბადის მოლეკულის წარმოშობას მხოლოდ სინგლეტურ მდგომარეობაში. გამოთვლილ იქნა წონასწორული მანძილი $R_0 =$

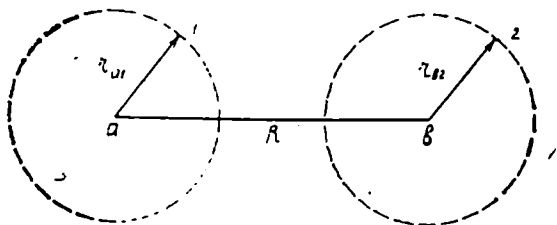


ნახ. 17.

$= 0.79 \text{ \AA}$, რაც კარგად ემთხვევა ექსპერიმენტულ მნიშვნელობას. მინიმუმის შესაბამისი ენერგია (იონიზაციის ენერგია) გამოთვლით მიიღება

$U_0 = 3,2\text{eV}$, რომელიც ცოტათი ნაკლებია მის ექსპერიმენტულ მნიშვნელობასთან შედარებით ($\sim 4,7\text{eV}$). მაგრამ ეს არ არის არსებითი. არსებითია ის გარემოება, რომ ამოცანის კვანტურ-მექანიკური განხილვა იძლევა ამომწურავ პასუხს ორი მთავარი საკითხისა: ა) ნაჭერობა ბმის ძალებისა, ე. ი. შეუძლებელია H_2 მოლეკულას შეუერთდეს მესამე ატომი და ბ) ორ ნეიტრალურ ატომს შორის მიზიდულობის არსებობა.

3. მოლეკულური კრისტალები. (ვან-დერ-ვალსის კრისტალები). გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ ვალენტური ძალები არსებითია მხოლოდ ახლო მანძილზე, ხოლო $R \gg R_0$ მანძილზე ეს ძალები თითქმის ნული ხდება, ასეთ მანძილებზე ნებისმიერ ატომებს შორის თავს იჩენენ ახალი ტიპის ძალები, რომლებსაც ვან-დერ-ვალსის, ანდა დისპერსიულ ძალებს



ნახ. 18.

უწოდებენ. ამ ძალების ბუნების გასაგებად განვიხილოთ ორი ნეიტრალური ატომი. გარკვეულ მანძილებზე მდებარე ორი ნეიტრალური ატომი აწარმოებს ურთიერთპოლარიზაციას, რის შედეგად მათ ენიჭებათ გარკვეული სიდიდის დიპოლური მომენტები, რომელთა ურთიერთქმედება გვაძლევს გარკვეული სიდიდის ბმას ატომებს შორის. ამოცანის კვანტურ-მექანიკური განხილვისათვის ავიღოთ წყალბადის ორი ატომი, რომლებიც მოთავსებულია a და b წერტილებში (ნახ. 18). თითოეული ატომი განვიხილოთ როგორც დიპოლი მომენტებით.

$$p_1 = e r_{a1} \text{ და } p_2 = e r_{b2}.$$

ველი, რომელსაც დიპოლი ქმნის R წერტილში (მეორე ატომის ცენტრში — R წერტილში) უდრის

$$E = \frac{3(p_1 R)R}{R^5} - \frac{p_1}{R^3}, \quad (1.57)$$

p_1 და p_2 დიპოლების ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგია უდრის — R_2 დიპოლის ენერგიას E ველში

$$U = -(p_2 E) = \frac{p_1 p_2}{R^3} - \frac{3(p_1 R)(p_2 R)}{R^5}. \quad (1.58)$$

თუ $0x$ ღერძს ავიღებთ a და b ატომების შემაერთებული ხაზის გასწვრივ, მაშინ

$$U = \frac{e^2}{R^3} (y_1 y_2 + z_1 z_2 - 2x_1 x_2). \quad (1.59)$$

თუ მივიღებთ U -ს შეშფოთების ენერგიად, მაშინ შრედინგერის შეშფოთების თეორიის მიხედვით შეიძლება გამოვთვალოთ ენერგიის პირველი და მეორე შესწორებები. გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ ენერგია პირველ მიახლოებაში ნულის ტოლია, ხოლო მეორე მიახლოება იძლევა

$$w(R) = \sum_{i,k} \frac{|u_{00ik}|^2}{2\varepsilon_0 - \varepsilon_i - \varepsilon_k}, \quad (1.60)$$

სადაც

$$\begin{aligned} U_{00ik} &= \int \psi_i^{0*}(1) \psi_k^{0*}(2) u \psi_0^0(1) \psi_0^0(2) dr_1 dr_2 = \\ &= \frac{e^2}{R^3} (y_1 y_2 + z_1 z_2 - 2x_1 x_2)_{00ik} \end{aligned} \quad (1.61)$$

მატრიცული ელემენტებია.

მაშასადამე, ვან-დერ-ვაალსის ურთიერთქმედება წარმოიშობა მხოლოდ შეშფოთების თეორიის მეორე მიახლოებაში. რადგანაც $w(R) < 0$, ვან-დერ-ვაალსის ძალები გვაძლევენ ატომის ძირითად მდგომარეობაში მხოლოდ მიზიდვას. მატრიცული ელემენტების $|u_{00ik}|$ ჩასმა ფორმულაში გვაძლევს

$$w(R) = -\frac{w_0}{R^6}, \quad (1.62)$$

სადაც

$$w_0 = e^4 \sum_{i,k} \frac{|y_1 y_2 + z_1 z_2 - 2x_1 x_2|_{00ik}}{|2\varepsilon_0 - \varepsilon_i - \varepsilon_k|}. \quad (1.63)$$

როგორც ვხედავთ, ვან-დერ-ვაალსის ძალები $F = -\frac{\partial w}{\partial R} \sim \frac{1}{R^7}$ ძალიან

სწრაფად ეცემიან მანძილის გადიდებით, ამიტომ სათანადო კრისტალები ხასიათდებიან (კრიპტონი, ქსენონი, მოლეკულური კრისტალები) სუსტი ბმით ვალენტურ და მეტალურ კრისტალებთან შედარებით. ამ კრისტალების დნობის ტემპერატურა, ასევე მოლეკულებს შორის ბმა, უფრო სუსტია, ვიდრე თვით მოლეკულაში შემაჯალ ატომებს შორის, ამიტომ ასეთი კრისტალების თვისება უფრო ახლოსაა მოლეკულის თვისებებთან, ვიდრე მყარი სხეულის თვისებასთან, რის გამო მყარი სხეულის თეორიაში მოლეკულური კრისტალები ნაკლებად განიხილებიან.

4. მეტალური კრისტალები. ღრუდეს თეორიის მიხედვით მეტალები წარმოადგენენ პერიოდულად დალაგებული დადებითი იონების სისტემას, რომელთა შორის მოძრაობენ თავისუფალი ელექტრონები, რომლებიც ადგენენ ე. წ. ელექტრონულ გაზს. ყოველი თავისუფალი ელექტრონი (ატომის სავალენტო ელექტრონები) კოლექტივიზირებულია მეტალის ყველა იონს შორის. ამიტომ ზმას აქვს არა ინდივიდუალური, არამედ კოლექტიური ხასიათი. ბმის ენერგია გამოითვლება კვანტური მექანიკის აპარატის გამოყენებით. აქ მოვიყვანთ მხოლოდ იმ ელემენტარულ გამოთვლებს, რომელიც მოგვცა ფრენკელმა მეტალის თავისუფალი ელექტრონების ჰიპოთეზაზე დაყრდნობით. განვიხილოთ $T=0$ ტემპერატურაზე ერთვალენტოვანი მეტალის 1 სმ³ მოცულობა, რომელიც შეიცავს n იონებს და n თავისუფალ ელექტრონებს. სტაციონარულ მდგომარეობაში ელექტრონულ ღრუბელთა სიმკვრივის მაქსიმუმები მოთავსებულია დადებითი იონების შუა წერტილებში. ამიტომ ელექტროსტატიკური თვალსაზრისით, მეტალი შეიძლება წარმოვიდგინოთ გარკვეული მიახლოებით, როგორც იონური კრისტალი, შემდგარი სხვადასხვა ნიშნის იონებისაგან. ასეთი კრისტალის კულონური პოტენციალური ენერგია, თანახმად წინა პარაგრაფისა, უდრის

$$U = - \frac{\alpha^* e^2}{R} \cdot n, \quad (1.64)$$

სადაც α^* მადელუნგის მუდმივას როლს ასრულებს, R —მინიმალური მანძილია „დადებით“ და „უარყოფით“ იონებს შორის. ელექტრონულ გაზში იგულისხმება ძლიერად გადაგვარებული გაზი. ასეთი გაზის ნულოვანი კინეტიკური ენერგია ϵ_k გამოთვლილია III თავში. შედეგი ასეთია: ენერგია გამოთვლილი ერთ ელექტრონზე უდრის:

$$w = \frac{u + E_k}{n} = - \frac{\alpha^* e^2}{R} + \frac{3^{5/3} \cdot \pi^{4/3} \cdot \hbar^2 \cdot n^{2/3}}{10m}$$

ანდა

$$w(R) = - \frac{\alpha^* e^2}{R} + \frac{3^{5/3} \cdot \pi^{4/3} \cdot 3\beta^{2/3} \cdot \hbar^2}{10nR^2}. \quad (1.65)$$

$n = \beta \cdot R^{-3}$ —დამოკიდებულია მეცხრის გეომეტრიაზე, ამიტომ უარყოფითი წევრი გვაძლევს მიზიდვის ძალების შესაბამის ელექტროსტატიკურ ენერგიას, მეორე დადებითი წევრი ეთანადება განზიდვის ძალებს, გამოწვეულს პაულის პრინციპით. ამრიგად, მიზიდვის ძალებია $\sim \frac{1}{R}$, განზიდვის ძა-

ლები $\sim \frac{1}{R^2}$. მათ ჯამს აქვს მინიმუმი $R=R_0$ წერტილში.

$$\left(\frac{\partial w}{\partial R}\right)_{R_0} = 0.$$

ეს გვაძლევს

$$R = 3\pi \sqrt[3]{\frac{9\pi\hbar^2}{5\alpha^*}}. \quad (1.66)$$

სადაც $a_0 = \frac{\hbar^2}{me} = 0,5 \cdot 10^{-8}$ სმ ბორის ორბიტის რადიუსია. R_0 -სათვის

მიიღება მნიშვნელობა, რომელიც ახლოსაა ცდასთან.

თ ა ზ ი II

მყარი სხეულის ატომების სითბური რხევები და სითბოტემპერატურის საკითხი

§ 1. მარტივი სხეულის ნაწილაკების სითბური რხევები და სითბოტემპერატურის კლასიკური თეორია

უპირველეს ყოვლისა, განვიხილოთ მყარი სხეული, რომელიც შედგება ერთატომიანი მოლეკულებისაგან. ეს ნაწილაკები მოცულობის შიგნით იკავებენ ცალკეულ წონასწორულ მდგომარეობებს, რომელთა ირგვლივ ისინი აწარმოებენ სითბურ რხევებს. როდესაც სხეულის ტემპერატურა ძალიან დიდი არ არის, მაშინ რხევის ამპლიტუდა ბევრად ნაკლებია მეზობელ ატომებს შორის მანძილებთან შედარებით. ეს გარემოება საშუალებას გვაძლევს სხეულის (ნაწილაკთა სისტემის) პოტენციალური ენერგია დავშალოთ მწკრივად, წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის მანძილის ხარისხებად,

$$\begin{aligned} U(x_n y_n z_n) = U(x_n^0 y_n^0 z_n^0) + \sum_n \left[\left(\frac{\partial U}{\partial x_n} \right)_{x_n^0} \cdot (x_n - x_n^0) + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial U}{\partial y_n} \right)_{y_n^0} \cdot (y_n - y_n^0) + \left(\frac{\partial U}{\partial z_n} \right)_{z_n^0} \cdot (z_n - z_n^0) \right] + \\ + \frac{1}{2} \sum_n \left[\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_n^2} \right)_{x_n^0} \cdot (x_n - x_n^0)^2 + \dots \right] + \\ + \frac{1}{3} \sum_n \left[\left(\frac{\partial^3 U}{\partial x_n^3} \right)_{x_n^0} \cdot (x_n - x_n^0)^3 + \dots \right] + \dots \end{aligned} \quad (2.1)$$

ვინაიდან წონასწორობის მდგომარეობაში თითოეულ ნაწილაკზე მოქმედი ძალის კომპონენტები ნულის ტოლია, ე. ი.

$$\left(\frac{\partial U}{\partial x_n} \right)_{x_n^0} = \left(\frac{\partial U}{\partial y_n} \right)_{y_n^0} = \left(\frac{\partial U}{\partial z_n} \right)_{z_n^0} = 0$$

და გარდა ამისა, კოორდინატების სათანადო გარდაქმნით შერეული წევრები $(x_n - x_n^0) \cdot (y_n - y_n^0)$, $(x_n - x_n^0)(z_n - z_n^0)$, ა. შ. შეიძლება ნულის ტოლი გახდეს, ამიტომ (2.1) გაშლა შემდეგი სახით შეიძლება ჩაევწერთ:

$$U(x_n y_n z_n) = U(x_n^0 y_n^0 z_n^0) + \frac{1}{2} \sum_n (\alpha_n' \xi_n^2 + \alpha_n'' \eta_n^2 + \alpha_n''' \zeta_n^2) - \frac{1}{3} \sum_n \beta_n' \xi_n^3 + \dots \quad (2.2)$$

სადაც

$$\alpha_n' = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_n^2} \right)_{x_n^0}, \quad \alpha_n'' = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial y_n^2} \right)_{y_n^0}, \quad \alpha_n''' = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial z_n^2} \right)_{z_n^0}$$

$$\beta_n' = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial x_n^3} \right)_{x_n^0} \text{ და ა. შ.} \quad (2.2a)$$

$$\xi_n = x_n - x_n^0, \quad \eta_n = y_n - y_n^0 \text{ და } \zeta_n = z_n - z_n^0$$

ξ_n , η_n და ζ_n წარმოადგენენ ნაწილაკის წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის მანძილების მდგენელებს სათანადოდ ox , oy და oz ღერძების მიმართულებით. მცირე რხევების შემთხვევაში შეიძლება შემოვიფარგლოთ კვადრატული წევრებით (პარამონიული მიახლოება):

$$U = U_0 + \frac{1}{2} \sum (\alpha_n' \xi_n^2 + \alpha_n'' \eta_n^2 + \alpha_n''' \zeta_n^2) \quad (2.3)$$

ამ შემთხვევაში n -ურ ნაწილაკებზე მოქმედი ძალის კომპონენტები იქნება:

$$F_{nx} = - \frac{\partial U}{\partial x_n} = - \frac{\partial U}{\partial \xi_n} = - \alpha_n' \xi_n$$

$$F_{ny} = - \frac{\partial U}{\partial y_n} = - \frac{\partial U}{\partial \eta_n} = - \alpha_n'' \eta_n \quad (2.4)$$

$$F_{nz} = - \frac{\partial U}{\partial z_n} = - \frac{\partial U}{\partial \zeta_n} = - \alpha_n''' \zeta_n$$

ამრიგად, პარამონიულ მიახლოებაში ნაწილაკზე მოქმედი ძალა წმინდასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის მანძილის პირდაპირპროპორციულია. ასეთ ძალებს უწოდებენ ღრეკად ძალებს, ხოლო პარამონიულობის კოეფიციენტს α_n — ღრეკადი ძალის კოეფიციენტს. n -უძი ნაწილაკის მოძრაობის განტოლებისათვის ვღებულობთ:

$$m \ddot{\xi}_n + \alpha_n' \xi_n = 0,$$

$$m\eta_n'' + \alpha_n'\eta_n = 0,$$

$$m\zeta_n'' + \alpha_n''\zeta_n = 0. \quad (2.5)$$

როგორც ვხედავთ, პოტენციალური ენერგიის გაშლას (2.3) სახით ეთანადება ნაწილაკების ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელი რხევები, რადგანაც, თანახმად (2.4) განტოლებისა, ყოველი ნაწილაკის მოძრაობა განისაზღვრება მხოლოდ ამ ნაწილაკის მდგომარეობიდან გადახრის მანძილით და არ არის დამოკიდებული სხვა ნაწილაკების კოორდინატებზე. მეორე მხრივ, როგორც ვიცით, მყარი სხეული ხასიათდება ნაწილაკების ძლიერი ურთიერთქმედებით, ამიტომ ყოველი ნაწილაკის მოძრაობა განპირობებულია დანარჩენი ნაწილაკების მოძრაობით. შედეგად ამისა, პოტენციალური ენერგიის გაშლას ექნება სხვა სახე, რომელიც განხილული იქნება შემდეგ პარაგრაფებში. ამ პარაგრაფში განხილული იქნება პოტენციალური ენერგიის (2.3) მიახლოება, რომელიც ეთანადება, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, ნაწილაკების ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელ რხევებს.

(2.5) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს ჰარმონიული ფუნქცია:

$$\xi_n, \eta_n, \zeta_n = \begin{cases} A \cdot \cos \omega t \\ A \cdot \sin \omega t \end{cases} \quad (2.6)$$

სადაც

$$\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}, \quad (\alpha_n' = \alpha_n'' = \alpha_n''' = \alpha) \quad (2.7)$$

ნაწილაკს, რომელიც აწარმოებს ჰარმონიულ რხევით მოძრაობას, უწოდებენ ჰარმონიულ ოსცილატორს. ამ შემთხვევაში ყოველი ნაწილაკის რხევითი მოძრაობა იშლება სამ დამოუკიდებელ რხევად ox , oy და oz ღერძების მიმართულებით. ამიტომ თითოეულ ნაწილაკს ეთანადება სამი დამოუკიდებელი წრფივი ოსცილატორი, ხოლო N ნაწილაკისაგან შემდგარ სხეულს— $3N$ წრფივი დამოუკიდებელი ოსცილატორი.

გამოეთვალათ წრფივი ოსცილატორის ენერგია,

ბოლცმანის კანონის თანახმად, ალბათობა იმისა, რომ ნაწილაკს გააჩნია ენერგია u , გამოისახება შემდეგი ფორმულით:

$$W = A e^{-\frac{U}{kT}},$$

სადაც

$$A = \frac{1}{\int e^{-\frac{U}{kT}} d\nu}.$$

წრფივი ოსცილატორისათვის

$$U = \frac{1}{2} \alpha \xi^2,$$

ამიტომ ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის ვღებულობთ:

$$\overline{u} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \alpha \xi^2 \cdot e^{-\frac{\alpha \xi^2}{2kT}} \cdot d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha \xi^2}{2kT}} \cdot d\xi} = -\frac{1}{2} \alpha \frac{\partial}{\partial \gamma} \ln \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma \xi^2} d\xi,$$

სადაც

$$\gamma = \frac{\alpha}{2kT}.$$

რადგანაც

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma \xi^2} d\xi = \sqrt{\pi/\gamma},$$

ამიტომ

$$\overline{u} = -\frac{1}{2} \alpha \frac{\partial}{\partial \gamma} \ln \sqrt{\pi/\gamma} = \frac{1}{2} kT.$$

წრფივი ოსცილატორის კინეტიკური ენერგია:

$$K = \frac{m \xi^2}{2}$$

ამიტომ, საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება:

$$\overline{K} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{m \xi^2}{2} \cdot e^{-\frac{m \xi^2}{2kT}} d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m \xi^2}{2kT}} d\xi} = -\frac{m}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \ln \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma \xi^2} d\xi = \frac{1}{2} kT.$$

ამრიგად ერთი წრფივი ოსცილატორის სრული ენერგია უდრის kT -ს. ვინაიდან ჰარმონიულ მიახლოებაში სხეული წარმოდგენილია 3 N წრფივი დამოუკიდებელი ოსცილატორის სახით, ამიტომ სხეულის სრული ენერგია იქნება:

$$E = 3NkT, \quad (2.8)$$

სითბოტევადობა:

$$C_v = \frac{dE}{dT} = 3Nk. \quad (2.9)$$

თუ ავიღებთ წიფთიერების ერთ გრამმოლს, მაშინ N იქნება ავოგადროს

რიცხვი, ხოლო $Nk = R$ — გაზების უნივერსალური მუდმივა. ამრიგად სხეულის ერთი გრამმოლის სითბოტევადობა

$$C_p \approx 3R \approx 6 \frac{\text{კალ.}}{\text{გრ. მ.}}$$

ეს უკანასკნელი ცნობილია დიულონგისა და პტის კანონის სახელწოდებით. თანახმად ამ კანონისა, მყარი სხეულის სითბოტევადობა ტემპერატურაზე დამოკიდებული არ არის და უდრის 6 კალ/გრ. მოლ. საჭიროა აღინიშნოს, რომ თუ პოტენციალური ენერგიის გაშლაში დავტოვებთ ანპარმონიულ წევრებს, მაგალითად, კუბურ წევრს, მაშინ სითბოტევადობის ფორმულაში მივიღებთ დამატებით წევრს, რომელიც აბსოლუტური ტემპერატურის პირდაპირპროპორციულია, მაბთლაც, თუ ავიღებთ

$$U = \frac{1}{2} \alpha \xi^2 - \frac{1}{3} \beta \xi^3, \quad (2.10)$$

მაშინ, ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის გვექნება:

$$\bar{u} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u e^{-\frac{U}{kT}} d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{U}{kT}} d\xi} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \alpha \xi^2 - \frac{1}{3} \beta \xi^3 \right) e^{-\frac{1}{kT} \left(\frac{1}{2} \alpha \xi^2 - \frac{1}{3} \beta \xi^3 \right)} d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{kT} \left(\frac{1}{2} \alpha \xi^2 - \frac{1}{3} \beta \xi^3 \right)} d\xi}.$$

ვიწიდან

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^{2n+1} e^{-\frac{\alpha \xi^2}{2kT}} d\xi = 0, \quad (n \text{ — მთელი რიცხვია})$$

ამიტომ

$$\bar{U} = \frac{1}{2} kT + \frac{5}{3} \cdot \frac{\beta^2 k^2}{\alpha^3} \cdot T^3.$$

სრული ენერგიისათვის ვღებულობთ:

$$E = 3NkT + \frac{5N\beta^2 k^2}{\alpha^3} \cdot T^3.$$

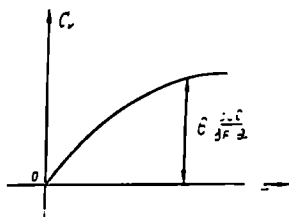
სითბოტევადობა

$$C_v = \frac{dE}{dT} = 3Nk + CT, \quad (2.11)$$

სადაც

$$C = \frac{10Nk^2\beta^2}{\alpha^3}.$$

დამატებითი წვერი CT როგორც დაბალ, ისე მაღალ ტემპერატურაზე წარმოადგენს უმნიშვნელო დამატებას დიულონგისა და პტის კანონით მოცემულ სითბოტევადობაზე. ჯამიტომ პრაქტიკულად მყარი სხეულის სითბოტევადობა, კლასიკური თეორიის მიხედვით, ტემპერატურაზე დამოკიდებული არ არის. ცდების თანახმად, დიულონგისა და პტის კანონი მაიხლოებით სამარაულიანია მხოლოდ მაღალ ტემპერატურაზე. დაბალ ტემპერატურაზე სხეულის სითბოტევადობა მცირეა და აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე უტოლდება ნულს, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 19-ზე. სითბოტევადობის ასეთნაირი ცვლილება ტემპერატურის მიხედვით თვისობრივად ახსნილ იქნა პირველად აინშტაინის მიერ, კვანტური თეორიის გამოყენებით.



ნახ. 19.

§ 2. აინშტაინის სითბოტევადობის თეორია

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, მყარი სხეულის ატომების სითბური რხევები შეიძლება წარმოდგენილი იქნეს $3N$ წრფივი დამოუკიდებელი ოსცილატორების საშუალებით. აინშტაინმა თითოეულ ოსცილატორს მიუწერა ენერგიის ის მნიშვნელობები, რომელსაც იძლევა კვანტური თეორია:

$$E_n = \hbar \nu \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n=0, 1, 2, \dots) \quad (2.12)$$

$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \nu$ -ს ეწოდება ნულოვანი ენერგია, იგი ტემპერატურის ფუნქციას არ წარმოადგენს, ამიტომ სხეულის სითბოტევადობის განხილვის დროს შეიძლება უგულებელყოფილი იქნეს. ამრიგად, წრფივი ოსცილატორის ენერგიის დასაშვები მნიშვნელობები მოიცემა ფორმულით:

$$E_n = n \hbar \nu \quad (2.12a)$$

ბოლცმანის კანონის თანახმად, ალბათობა იმისა, რომ ოსცილატორი იმყოფება E_n ენერგიის მდგომარეობაში, მოიცემა ფორმულით:

$$W_n = A e^{-\frac{E_n}{kT}}$$

სადაც

$$A = \frac{1}{\sum e^{-\frac{E_n}{kT}}}$$

ამიტომ, ოსცილატორის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის მივიღებთ:

$$\bar{E} = \sum e_n W_n = h\nu \frac{\sum_n n e^{-\frac{h\nu n}{kT}}}{\sum_n e^{-\frac{h\nu n}{kT}}}.$$

შემოვიტანოთ შემდეგი აღნიშვნა: $e^{-\frac{h\nu}{kT}} = x$, მაშინ

$$\bar{E} = h\nu \frac{\sum_n n x^n}{\sum_n x^n} = h\nu \cdot x \frac{\partial}{\partial x} \ln \sum_n x^n.$$

ვინაიდან $x \ll 1$, ამიტომ

$$\sum_n x^n = \frac{1}{1-x}.$$

მაშასადამე

$$\bar{E} = h\nu \cdot x \frac{d}{dx} \ln \frac{1}{1-x} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \quad (2.13)$$

ოსცილატორის ენერგიის საშუალო მნიშვნელობისათვის ასეთივე ფორმულა მიღებულ იქნა აგრეთვე პლანკის მიერ, იმ დაშვებიდან, რომ შავი სხეული ენერგიას ასხივებს ან შთანთქმავს კვანტების სახით, ამიტომ (2.13) ფორმულას უწოდებენ აინშტაინ-პლანკის ფორმულას.

თუ დავუშვებთ, რომ სხვადასხვა ოსცილატორს სხვადასხვა სიხშირეები აქვთ, მაშინ სხეულის ენერგიისათვის მივიღებთ:

$$E = \sum_1^{3N} \frac{h\nu_i}{e^{\frac{h\nu_i}{kT}} - 1}. \quad (2.14)$$

თუ სიხშირის სპექტრი უწყვეტია, მაშინ ჯამი ინტეგრალით შეიცვლება

$$E = \int_0^{\nu_m} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \cdot f(\nu) d\nu, \quad (2.15)$$

სადაც $f(\nu) d\nu$ წარმოადგენს ოსცილატორთა რიცხვს, რომელთა სიხშირე მათევსებუღია ν და $\nu + d\nu$ -ს შორის. ν_m — არის ოსცილატორის მაქსიმალური სიხშირე, რომელიც განისაზღვრება შემდეგი პირობიდან:

$$\int_0^{\nu_m} f(\nu) d\nu = 3N. \quad (2.16)$$

(2.14) და (2.15) ფორმულების საშუალებით შეიძლება გამოვთვალოთ სხეულის სითბოტევადობა:

$$C_v = \frac{dE}{dT} = \sum_1^{3N} k \cdot \left(\frac{h\nu_i}{kT} \right)^2 \cdot \frac{e^{\frac{h\nu_i}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu_i}{kT}} - 1 \right)^2}$$

ანდა

$$C_v = \int_0^{\nu_m} k \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \cdot \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)^2} \cdot f(\nu) d\nu. \quad (2.17)$$

აინშტაინმა ყველა ოსცილატორს მიუწერა ერთი და იგივე სიხშირე ν , ამიტომ სრული ენერგიისა და სითბოტევადობისათვის ვღებულობთ:

$$E = 3N \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (2.18)$$

$$C_v = 3Nk \cdot \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \cdot \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)^2}.$$

განვიხილოთ ცალ-ცალკე მაღალი და დაბალი ტემპერატურის შემთხვევა:

ა) მაღალ ტემპერატურაზე $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$, ამიტომ თუ $e^{\frac{h\nu}{kT}}$ -ს დავშლით მწკრივად $\frac{h\nu}{kT}$ -ს ხარისხებად, მაშინ (2.18) ფორმულები გვაძლევენ კლასიკურ შედეგს:

$$E = 3NkT,$$

$$C_v = 3Nk.$$

იგივე შედეგი მიიღება (2.17) ფორმულებიდან, დამოუკიდებლად $f(\nu)$ ფუნქციის კონკრეტული სახისა, თუ გავითვალისწინებთ (2.16) დამოკიდებულებას.

ბ) დაბალ ტემპერატურაზე $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$, ამიტომ (2.18) ფორმულებში ერთის გადაგდება შეიძლება, ეს გვაძლევს:

$$E \approx 3N h \nu \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}} \rightarrow 0 \text{ როცა } T \rightarrow 0$$

და

(2.19)

$$C_V \approx 3Nk \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}} \rightarrow 0 \text{ ,, } T \rightarrow 0.$$

როგორც ვხედავთ, ანშტაინის თეორია მაღალ ტემპერატურაზე იძლევა კლასიკურ შედეგს, ხოლო დაბალ ტემპერატურაზე ენერგია და სითბოტევადობაც მიისწრაფვის ნულისაკენ ექსპონენციური კანონით ($\sim e^{-\frac{h\nu}{kT}}$), რომელიც თვისობრივად ხსნის ნახ. 19-ზე მოცემულ დამოკიდებულებას სითბოტევადობასა და ტემპერატურას შორის. თანახმად ცდისა, დაბალ ტემპერატურაზე სითბოტევადობა მიისწრაფვის ნულისაკენ $C_V \sim T^3$ კანონით. ცდისა და თეორიის ეს შეუსაბამობა აიხსნება იმით, რომ, როგორც კლასიკურ თეორიაში, ისე ანშტაინის განხილვაში მხედველობაში არ იყო მიღებული მყარი სხეულის ნაწილაკებს შორის ძლიერი ურთიერთქმედება. ეს უკანასკნელი გათვალისწინებულ იქნა დებაის მიერ, რომელმაც სითბოტევადობისათვის დაბალ ტემპერატურაზე მიიღო $C_V \sim T^3$ კანონი. მყარი სხეულის ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების გათვალისწინება წარმოადგენს მეტად რთულ მათემატიკურ ამოცანას. ამიტომ უპირველეს ყოვლისა განვიხილავთ ერთგანზომილებიანი მესერის შემთხვევას და მიღებულ შედეგებს განვაზოგადებთ სამგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში. /

§ 3. მართნაირი ატომებისაგან შემდგარი წარმოშობის მესერის რხევა

ვაქვით, ერთნაირი ატომები დალაგებულნი არიან წრფეზე და დაშორებულნი არიან ერთმანეთისაგან a მანძილით. ატომების ასეთი მწყრივი შეიძლება განვიხილოთ როგორც ერთგანზომილებიანი მესერი. თუმცა მას არაერთი საერთო არა აქვს რეალურ სამგანზომილებიან მესერთან, მაგრამ, როგორც ამას ქვემოთ დავინახავთ, ასეთი ერთგანზომილებიანი მესერის რხევის განხილვიდან შეიძლება გამოვიტანოთ ზოგიერთი დასკვნა, რომლებიც ძალაში რჩება სამგანზომილებიანი მესერისთვისაც. სიმარტივისათვის განვიხილოთ ატომთა მწყრივის მხოლოდ სიგრძივი რხევები. გარდა ამისა, მივიღოთ, რომ ყოველი ატომი განიცდის მხოლოდ ორი უახლოესი მეზობელი ატომის მოქმედება¹. მე-

¹ აღებულ ატომზე ყველა სხვა ატომების მოქმედების გათვალისწინება იძლევა თითქმის იგივე შედეგს, რაც ზემოთ მოცემული დაშვება. ეს გარემოება დაკავშირებულია იმასთან, რომ ატომებს შორის ურთიერთქმედების ძალები ძალიან სწრაფად მცირდება მანძილის გადიდებით.

ზობელ ატომებს შორის ურთიერთქმედების ძალა წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$F_{n, n-1} = -\alpha(\xi_n - \xi_{n-1}). \quad (2.20)$$

α არის დრეკადი ძალის კოეფიციენტი, ხოლო $\xi_n - \xi_{n-1}$ — ორ მეზობელ ატომთა შორის წონასწორული მანძილის ცვლილება მათი რხევის შედეგად. ადვილად შეიძლება დავრწმუნდეთ იმაში, რომ (2.20) დაშვებას ეთანადება პოტენციალური ენერგია

$$u = \frac{1}{2} \sum_1^N \alpha (\xi_n - \xi_{n-1})^2 \quad (2.21)$$

ამ შემთხვევაში n -ური ნაწილაკის მოძრაობის განტოლება იქნება:

$$m \frac{d^2 \xi_n}{dt^2} = - \frac{\partial u}{\partial \xi_n} = -\alpha(2\xi_n - \xi_{n-1} - \xi_{n+1}) \quad (2.22)$$

ეს განტოლება სამართლიანია ზემოთ განხილული მწკრივის ყველა ატომისათვის, გარდა კიდურისა, რომელთაც მხოლოდ ერთი უახლოესი ატომი გააჩნიათ მეზობლად. ცხადია, კიდური ატომებისათვის უნდა დაიწეროს (2.22)-ის ანალოგიური განტოლებები და ბოლოს მიღებული განტოლებათა სისტემა ერთად ამოიხსნას. ვინაიდან კიდური ატომების მოძრაობის განტოლება განსხვავებულია (2.22) განტოლებისაგან, ამიტომ მიღებული განტოლებათა სისტემის ამოხსნა მეტად რთულ ამოცანას წარმოადგენს. მეორე მხრივ, ვინაიდან N ძალზე დიდია, ამიტომ კიდური ატომებზე ნებისმიერი პირობის დადება გავლენას არ მოახდენს საძიებელ სიხშირეთა სპექტრზე. ასე მაგალითად, შეიძლება მივიღოთ, რომ კიდური ატომები უძრავია, ე. ი.

$$\xi_0 = \xi_{N-1} = 0. \quad (2.23)$$

ეს პირობა, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, საშუალებას იძლევა ატომთა მწკრივის მოძრაობა-რხევები აღვწერათ სტანდარტული სიხშირის მდგარი ტალღების სუპერპოზიციის საშუალებით. (2.23) პირობის ნაცვლად ზშირად იყენებენ ბორნ-კარმანის პერიოდულობის პირობას, რომლის შინაარსი მდგომარეობს შემდეგში: აღებულ ატომთა მწკრივის ბოლოებზე ეუმეტებთ თითო ატომს, რომლებსაც ერთი და იგივე ფაზები აქვთ. სხვაწაირად რომ ვთქვათ, ეს დაშვება ტოლფასია იმისა, რომ ატომთა მწკრივი შევკრათ წრედ. ამ შემთხვევაში მწკრივის ყველა ატომი სრულიად ეკვივალენტურ პირობებში იქნებიან. მათემატიკურად ბორნ-კარმანის პირობა ჩაიწერება შემდეგნაირად:

$$\xi_n(l, \nu) = \xi_n(l + N, \nu). \quad (2.24)$$

l —მთელი რიცხვია, n —მწკრივში ატომის ნომერია. ბორნი-კარმანის პერიოდულობის პირობის გამოყენება, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, საშუალებას იძლევა ატომთა სისტემის მოძრაობა-რხევები აღვწეროთ სხვადასხვა სიხშირის გამრბენი ტალღების სუპერპოზიციის საშუალებით. ამ შემთხვევაში არ დაგვირდება ატომთა უსასრულო მწკრივის შემოტანა, რაც ფრიად ამარტივებს მათემატიკურ აპარატს. ქვემოთ გამოვიყენებთ ორივე სასაზღვრო პირობას (2.23) და (2.24) და ვუჩვენებთ, რომ საძიებელ სიხშირეთა სპექტრისათვის ორივე გვაძლევს ერთსა და იმავე შედეგს. (2.22) განტოლების ამოხსნას, რომელიც აკმაყოფილებს ბორნი-კარმანის პირობას, აქვს შემდეგი სახე:

$$\xi_n = A e^{i 2 \pi \left(\frac{l}{N} n - \nu t \right)}. \quad (2.25)$$

სადაც A არის მუდმივი სიდიდე, l —მთელი რიცხვია და ν —საძიებელი სიხშირე. თუ (2.25) ფორმულას შევადარებთ $o x$ ღერძის მიმართულებით გავრცელებულ გამრბენ ტალღის ფორმულას,

$$\xi_n = A e^{i (k x - \omega t)}, \quad (2.26)$$

სადაც $x = a n$ —ატომთა დისკრეტული. განაწილების შემთხვევაში, მაშინ ტალღის სიგრძე და ტალღური რიცხვი ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\lambda = \frac{N a}{l},$$

$$k = \frac{2 \pi l}{N a} = \frac{2 \pi}{\lambda}. \quad (2.27)$$

თუ (2.25) ამოხსნას შევიტანთ (2.22) განტოლებაში, მაშინ მარტივი გარდაქმნების შემდეგ მივიღებთ ν -თვის შემდეგ ფორმულას

$$\omega = 2 \pi \nu = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin \frac{\pi l}{N} = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin \frac{k a}{2}. \quad (2.28)$$

თუ l -ს მივცემთ მნიშვნელობებს $1, 2, \dots, N$, მივიღებთ (2.22) განტოლების ყველა ამოხსნას. ამრიგად, დამოუკიდებელ ამოხსნათა რიცხვი უდრის მოცემული სისტემის თავისუფლების ხარისხს. როგორც ვიცით, ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულებით გავრცელებულ ერთი და იგივე სიხშირის გამრბენ ტალღათა სუპერპოზიციის გზით მიიღებთან მდგარი ტალღები. ამიტომ თუ (2.28) ფორმულაში l -ს მივცემთ როგორც დადებით ისე უარყოფით მნიშვნელობებს ($l = \pm l'$) და შემდეგ მიღებულ ამოხსნებს სათანადოდ დავჯავუფებთ, მივიღებთ გამრბენი ტალღების ნაცვლად მდგარ ტალღებს. თუ მხედველობაში მივიღებთ იმ გარემოებას, რომ ბორნი-კარმანის პერიოდულობის პირობის თანახმად, ამოხსნები,

რომლებიც ეთანადებიან $l=l'$ და $l=l'+N$, არ არიან დამოუკიდებელი, მაშინ დამოუკიდებელი ამოხსნები მდგარი ტალღების სახით იქნება ისევ N -ის ტოლი, რომლებიც მიიღებიან, თუ l -ს მივცემთ როგორც დადებით ისე უარყოფით მნიშვნელობას 1-დან $N/2$ -მდე.

თანახმად (2.26) ამოხსნისა, თუ ტალღურ რიცხვს k -ს შევცვლით $k + \frac{\pi}{a}g$ სიდიდით, სადაც g მთელი რიცხვია, მივიღებთ იმავე ტალღას, მართლაც

$$\tilde{\psi}_n' = Ae^{i\left(k + \frac{2\pi}{a}g\right)an - \omega t} = Ae^{i(kan - \omega t)} \cdot e^{i2\pi gn}$$

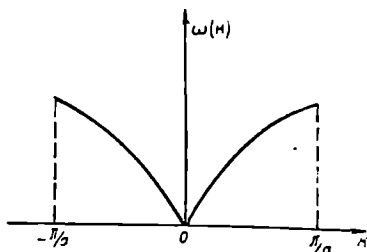
ვინაიდან gn მთელი რიცხვებია, ამიტომ

$$e^{i2\pi gn} = 1.$$

მაშასადამე, k და $k + \frac{2\pi}{a}g$ ტალღური რიცხვები ფიზიკურად ეკვივალენტური არიან, ამიტომ ყოველთვის შეგვიძლია g რიცხვი ისე შევარჩიოთ, რომ k -ს ყველა მნიშვნელობა აღმოჩნდეს $\frac{\pi}{a}$ და $-\frac{\pi}{a}$ -ს შორის, ე. ი.

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \quad \text{ან} \quad -\frac{1}{2a} \leq \frac{k}{2\pi} \leq \frac{1}{2a}. \quad (2.29)$$

ტალღური რიცხვის ცვლილების ზემოთ აღნიშნულ არეს უწოდებენ ბრილუენის ცენტრალურ ზონას (იხ. თავი IV). ნახ. 20-ზე ნაჩვენებია ω -ს დამოკიდებულება k -გან. ხშირად სარგებლობენ k -ს მხოლოდ დადებითი მნიშვნელობებით, რომელიც იცვლება 0-დან π/a -მდე.



ნახ. 20.

k -ს მაქსიმალური მნიშვნე-

ლობა $k_{max} = \frac{2\pi}{\lambda_{min}} = \frac{\pi}{a}$, აქედან $\lambda_{min} = 2a$. ამრიგად, ატომთა დისკრე-

ტული განაწილების შემთხვევაში მინიმალური ტალღის სიგრძე უდრის $2a$ -ს, რაც სავსებით გასაგებია. მინიმალურ ტალღის სიგრძეს ეთანადება

მაქსიმალური სიხშირე $\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$, რაც არსებითად დამახასიათებელია ატომთა დისკრეტული სტრუქტურის რხევებისათვის.

განვიხილოთ ახლა (2.22) განტოლების ამოხსნა (2.23) სასაზღვრო პირობის გამოყენებით. ამისათვის (2.22) განტოლების ამოხსნა ვეძიოთ შემდეგი სახით:

$$\xi_n = A \cos(\omega t - \varphi_n + \gamma_1) + B \cos(\omega t + \varphi_n + \gamma_2).$$

სასაზღვრო პირობა $\xi_0 = 0$, გვაძლევს

$$A \cos(\omega t + \gamma_1) + B \cos(\omega t + \gamma_2) = 0.$$

იმისათვის, რომ ეს უკანასკნელი დაკმაყოფილდეს ნებისმიერი t -თვის, საპირობა

$$A = -B \text{ და } \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma.$$

ამიტომ

$$\xi_n = 2A \sin(\varphi_n) \sin(\omega t + \delta).$$

მეორე სასაზღვრო პირობის $\xi_{N-1} = 0$ -ს გამოყენება გვაძლევს:

$$\sin \varphi(N-1) = 0.$$

აქედან

$$\varphi = \frac{\pi l}{N-1} \simeq \frac{\pi l}{N} = \varphi_l.$$

$$(l=1, 2, \dots, N).$$

(2.30)

საბოლოოდ ξ_n -სათვის ვღებულობთ:

$$\xi_{nl} = A_l \sin(\varphi_l n) \sin(2\pi \nu_l + \delta) \quad (2.31)$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს მდგარი ტალღის ფორმულას. თუ (2.31) ამოხსნას შევიტანთ (2.22) განტოლებაში, მივიღებთ:

$$\omega_l = 2\pi \nu_l = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin \frac{\pi l}{N} = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin \frac{ka}{2}.$$

ამრიგად, სისწირეთა სპექტრისათვის მივიღეთ იგივე ფორმულა (2.28). ტალღის სიგრძე

$$\lambda = \frac{2\pi a}{\varphi_l} = \frac{2a(N-1)}{l} \simeq \frac{2aN}{l} = \frac{2L}{l}, \quad (2.32)$$

სადაც $L = Na$ ატომთა მწკრივის სიგრძეა.

როდესაც $l=1$ ვღებულობთ $\lambda_{max.} = 2L$

$$" \quad l=N \quad " \quad \lambda_{min.} = 2a \quad (2.33)$$

მაშასადამე, მოცემულ ატომთა დისკრეტული სისტემის სითბური რხევები შეიძლება წარმოდგენილი იქნეს N მდგარი ტალღათა სუპერპოზიციის სახით, რომელთა ტალღის სიგრძე მოთავსებულია $2a$ და $2L$ -ს შორის. ატომთა სისტემის უწყვეტად განაწილების შემთხვევაში ($a \rightarrow 0$) მათი სით-

ბური რხევების აღწერისათვის მივიღებდით ტალღების უსასრულო რიცხვს, რომელთა ტალღის სიგრძე მოთავსებული იქნება 0 და $2L$ -ს შორის. ატომთა დისკრეტული განაწილების შემთხვევაში ვლებულობთ იმდენ ტალღას, რამდენსაც უდრის მოცემული სისტემის თავისუფლების ხარისხი. v სიხშირის ტალღის გავრცელების სიჩქარე

$$C = \lambda v = \frac{\omega}{k} = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \frac{\sin \frac{ka}{2}}{k} \quad (2.34)$$

დამოკიდებულია ტალღის სიგრძეზე (ანდა ტალღურ რიცხვზე), ე. ი. სხვადასხვა სიხშირის ტალღები ვრცელდება სხვადასხვა სიჩქარით (ტალღათა დისპერსია). გრძელი ტალღები ($\lambda \gg a$ ანდა $k \rightarrow 0$) კი ვრცელდება ერთნაირი სიჩქარით, რომელიც ემთხვევა მაკროსკოპიულ თეორიაში დრეკადი ტალღების გავრცელების სიჩქარეს¹.

გრძელი ტალღების შემთხვევაში

$$v_l = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin \frac{ka}{2} \simeq a \sqrt{\frac{\alpha}{m}} k = c_0 k. \quad (2.36)$$

ასეთივე დამოკიდებულება გვაქვს სიხშირესა და ტალღურ რიცხვს შორის მაკროსკოპიულ თეორიაში. ამრიგად, გრძელი ტალღების შემთხვევაში სხეულის ატომური სტრუქტურა შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ და განვიხილოთ იგი როგორც უწყვეტი გარემო.

ზოგად შემთხვევაში, როდესაც სიხშირე ω დამოკიდებულია ტალღურ რიცხვზე, საჭიროა გავარჩიოთ ერთმანეთისაგან ფაზური სიჩქარე v_ϕ (რომლითაც ვრცელდება მონოქრომატული ტალღის ფაზა) ჯგუფური $v_{გ}$ სიჩქარისაგან (რომლითაც ვრცელდება ტალღათა პაკეტი), რომელთა ტალღური ვექტორი მოთავსებულია k და $k+dk$ -ს შორის. ფაზური და ჯგუფური სიჩქარეები მოცემულია შემდეგი ფორმულებით:

$$v_\phi = \frac{\omega}{|k|} \quad \text{და} \quad v_{გ} = \frac{d\omega}{dk} \quad (2.37)$$

¹ მაკროსკოპიულ თეორიაში დრეკადი სიგრძივი ტალღების გავრცელების სიჩქარე მოცემულია შემდეგი ფორმულით $v = \sqrt{E/\rho}$, სადაც E არის დრეკადობის მოდული და ρ — გარემოს სიმკვრივე. მოცემულ ატომთა მწყრივის შემთხვევაში $\rho = \frac{m}{a}$ და $E =$

$$= \frac{F_{n1n-1}}{\xi_n - \xi_{n-1}} = \alpha a.$$

ამრიგად

$$v = \sqrt{\frac{E}{\rho}} = a \sqrt{\frac{\alpha}{m}} = c_0. \quad (2.35)$$

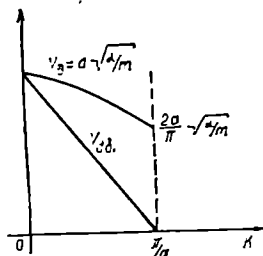
გრძელი ტალღების შემთხვევაში, თანახმად (2.36) ფორმულებისა,

$$v_{\text{ფ.}} = v_{\text{კვ.}} = c_0.$$

ზოგად შემთხვევაში, თანახმად (2.28) დამოკიდებულებისა

$$v_{\text{ფ.}} = c_0 \cdot \frac{\sin \frac{ka}{2}}{\frac{ka}{2}} \quad \text{და} \quad v_{\text{კვ.}} = c_0 \cdot \cos \frac{ka}{2}. \quad (2.38)$$

ნახ. 21-ზე მოცემულია $v_{\text{ფ.}}$ და $v_{\text{კვ.}}$ -ის დამოკიდებულება ტალღური ვექტორისაგან, საჭიროა აღვნიშნოთ, რომ წგუფური სიჩქარე, რომლითაც ხდება ენერგიის გადატანა, მისი წრფეების ნულისაგან, როდესაც ტალღის სიგრძე მისი წრფეების მისი მინიმალური მნიშვნელობისაგან.



ნახ. 21.

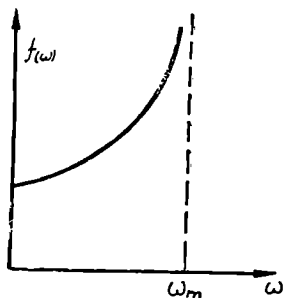
დასასრულს განვიხილოთ სიხშირეთა განაწილების $f(\nu)$ ფუნქციის სახე ერთგანზომილებიანი ატომა მჭკრივის შემთხვევაში. განმარტების თანახმად, სიხშირეთა განაწილების ფუნქცია გვაძლევს რხევათა (ტალღათა) რიცხვს, რომელიც

მოდის სიხშირის ერთეულ ინტერვალზე, ე. ი.

$$\frac{dl}{d\nu} \cdot d\nu = f(\nu) d\nu.$$

თანახმად (2.28) ფორმულისა

$$\begin{aligned} f(\nu) &= \frac{dl}{d\nu} = \frac{1}{\frac{d\nu}{dl}} = \frac{Na}{\frac{dk}{dl}} = \\ &= \frac{N \sqrt{m/\alpha}}{\sqrt{1 - \frac{\pi^2 m}{\alpha} \cdot \nu^2}}. \end{aligned} \quad (2.39)$$



ნახ. 22.

ამ ფუნქცია ის გრაფიკი ნაჩვენებია ნახ. 22-ზე.

თანახმად (2.39) ფორმულისა, როდესაც $\omega = \omega_{\text{max}}$, ვღე ბულობთ $f(\nu) \rightarrow \infty$. ქვემოთ ვერყენებთ, რომ სამგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში

$$f(\nu) \sim \nu^2.$$

§ 4. ნორმალურ კოორდინატებზე გადასვლა

ვინაიდან (2.22) დიფერენციალურ განტოლებათა სისტემა წრფივია, ამიტომ მის ზოგად ამოხსნას წარმოადგენს (2.31) ამოხსნათა წრფივი კომბინაცია

$$\xi_n = \sum_e \xi_{ne} = \sum_e A_e \sin(\varphi_e n) \sin(\omega_e t + \delta). \quad (2.40)$$

ამ შემთხვევაში მწკრივის ნებისმიერი წერტილის მოძრაობა-რხევა წარმოდგენილია N ტალღათა სუპერპოზიციის სახით, რომელთა ტალღის სიგრძე მოთავსებულია $2a$ და $2L$ -ს შორის. შემოვიტანოთ შემდეგი აღნიშვნა

$$A_e \sin(\omega_e t + \delta) = \sqrt{\frac{2}{N}} q_e(t), \quad (2.41)$$

მაშინ (2.40) მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\xi_n = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_e q_e(t) \cdot \sin(\varphi_e n). \quad (2.42)$$

აღვილად შეიძლება ვუჩვენოთ, რომ $q_e(t)$ სიდიდეები წარმოადგენენ სისტემის ნორმალურ კოორდინატებს. ისინი აგვიწერენ სისტემის დასაშვებ რხევებს. როგორც ცნობილია, სისტემის პოტენციალური და კინეტიკური ენერგიები, გამოსახული ნორმალურ კოორდინატებში, შეიცავენ მხოლოდ q_e^2 და $\dot{q}_e^2$ სიდიდეებს (არ გვექნება $q_e \cdot \dot{q}_e$ —სახის წევრები). ამის დასამტკიცებლად სისტემის პოტენციალური და კინეტიკური ენერგია გამოვსახოთ $q_{e(t)}$ კოორდინატებში. მოცემულ ატომთა სისტემის კინეტიკური ენერგიას აქვს შემდეგი სახე

$$T = \frac{m}{2} \sum_1^N \dot{\xi}_n^2.$$

მაგრამ, თანახმად (2.42) დამოკიდებულებისა

$$\dot{\xi}_n^2 = \frac{2}{\pi} \sum_e \dot{q}_e \sin(\varphi_e n) \sum_{e'} \dot{q}_{e'} \sin(\varphi_{e'} n).$$

ამიტომ

$$T = \frac{m}{N} \sum_{ee'} \dot{q}_e \dot{q}_{e'} \sum_n \sin(\varphi_e n) \sin(\varphi_{e'} n).$$

თუ გამოვიყენებთ სინუსების ორთოგონალობის პირობას

$$\sum \sin(\varphi_e n) \sin(\varphi_{e'} n) = \begin{cases} N/2 & \text{როდესაც } \varphi_e = \varphi_{e'} \\ 0 & \text{, } \varphi_e \neq \varphi_{e'} \end{cases}$$

მივიღებთ

$$T = \frac{1}{2} m \sum_e \dot{q}_e^2$$

ახლა განვიხილოთ მოცემულ ატომთა სისტემის პოტენციალური ენერგია

$$U = \frac{1}{2} \alpha \sum (\xi_{n+1} - \xi_n)^2.$$

თანახმად (2.42) დამოკიდებულებისა,

$$\begin{aligned} \xi_{n+1} - \xi_n &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum q_e \left(\sin \varphi_e (n+1) - \sin \varphi_e n \right) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_e q_e \cdot 2 \sin \frac{\varphi_e}{2} \cos \varphi_e \left(n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

ამიტომ

$$U = \frac{4\alpha}{N} \sum_{ee'} q_e q_{e'} \sin \frac{\varphi_e}{2} \cdot \sin \frac{\varphi_{e'}}{2} \sum_n \cos \varphi_e (n + 1/2) \cos \varphi_{e'} (n + 1/2).$$

თუ გამოვიყენებთ კოსინუსების ორთოგონალობის პირობას

$$\sum_n \cos \varphi_e (n + 1/2) \cos \varphi_{e'} (n + 1/2) = \begin{cases} \frac{N}{2}, & \text{როდესაც } \varphi_e = \varphi_{e'}, \\ 0, & \text{" } \varphi_e \neq \varphi_{e'}. \end{cases}$$

მივიღებთ

$$U = \frac{\alpha}{2} \sum q_e^2 \left(2 \sin \frac{\varphi_e}{2} \right)^2 = \frac{1}{2} m \sum \omega_e^2 q_e^2.$$

სრული ენერგიისათვის ვღებულობთ:

$$E = T + U = \frac{1}{2} m \sum_e (\dot{q}_e^2 + \omega_e^2 q_e^2). \quad (2.43)$$

როგორც ვხედავთ, სისტემის ენერგია შეიცავს მხოლოდ $\dot{q}_e^2$ და q_e^2 სიდიდეებს, რაც დამადასტურებელია იმისა, რომ $q_e(t)$ სიდიდეები წარმოადგენენ მოცემულ ატომთა სისტემის ნორმალურ კოორდინატებს. (2.43) ჯამის ყოველი შესაყრები

$$\epsilon_e = \frac{1}{2} m (\dot{q}_e^2 + \omega_e^2 q_e^2) \quad (2.44)$$

წარმოადგენს წრფივი ოსცილატორის სრულ ენერგიას. ამრიგად, მივიღეთ ფრიად მნიშვნელოვანი შედეგი: ღრეკადი ძალებით დაკავშირებული

ატომთა სისტემა შეიძლება შეცვლილი იქნეს სხვადასხვა სიხშირის N დამოუკიდებელი წრფივი ოსცილატორთა ერთობლიობით. ეს ოსცილატორები ერთანადებიან არა ცალკეული ატომების რხევებს, არამედ სისტემის ნორმალურ რხევებს.

სრულიად იგივე შედეგი მიიღება იმ შემთხვევაში, თუ (2.22) განტოლებათა სისტემის ამოხსნას ვეძებთ (2.25) გამარბენი ტალღების საშუალებით.

ვიწინიდან ატომის წანაცვლება არსი სიდიდეა, ამიტომ

$$\xi_n = A_k e^{i(kan - \omega_k t)} + A_k^* e^{-i(kan - \omega_k t)} = 2|A_k| \cos(kan - \omega_k t + \alpha_k),$$

სადაც

$$A_k = |A_k| e^{i\alpha_k}$$

ამრიგად, (2.22) განტოლების ზოგადი ამოხსნა შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი სახით

$$\begin{aligned} \xi_n &= \sum_k (A_k e^{i(kan - \omega_k t)} + A_k^* e^{-i(kan - \omega_k t)}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum (a_k e^{i kan} + a_k^* e^{-i kan}), \end{aligned} \quad (2.45)$$

სადაც

$$a_k = \sqrt{N} A_k e^{-i\omega_k t}. \quad (2.46)$$

ჩვენ ქვემოთ ვუჩვენებთ, რომ a_k სიდიდეები წარმოადგენენ მოცემული სისტემის ნორმალურ კოორდინატებს. ამიტომ (2.45) დამოკიდებულება შეიძლება განვიხილოთ როგორც გარდაქმნა ξ_n კოორდინატებიდან a_k ნორმალურ კოორდინატებზე.

თანახმად (2.46) დამოკიდებულებისა,

$$\dot{a}_k = -i\omega_k a_k \text{ და } \dot{a}_k^* = i\omega_k a_k^*.$$

თუ ამ უკანასკნელს გავითვალისწინებთ, მაშინ მოცემული სისტემის კინეტიკური ენერგია მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} m \sum \dot{\xi}_n^2 = \frac{1}{2} m \sum_n \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k (\dot{a}_k e^{i kan} + \dot{a}_k^* e^{-i kan}) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} (\dot{a}_{k'} e^{i k' an} + \\ &+ \dot{a}_{k'}^* e^{-i k' an}) = -\frac{m}{2N} \sum_k \sum_{k'} \omega_k \omega_{k'} \{ a_k a_{k'} e^{i(k+k')an} - a_k a_{k'}^2 e^{i(k-k')an} - \\ &- a_k^* a_{k'} e^{-i(k-k')an} + a_k^* a_{k'}^2 e^{-i(k+k')an} \}. \end{aligned}$$

ადვილად შეიძლება ვუჩვენოთ, რომ¹

$$\sum_1^N e^{ikgn} = \sum_1^N e^{\frac{2\pi i}{N} gn} = \begin{cases} 0, & \text{როდესაც } k \neq 0 \text{ ან } g \neq 0 \\ N, & \text{,, } k=0 \text{ ,, } g=0 \end{cases}$$

ამრიგად

$$\sum_1^N e^{i(k+k')a_n} = \begin{cases} 0, & \text{როდესაც } k+k' \neq 0 \\ N, & k+k'=0 \text{ ან } k'=-k \end{cases}$$

ამ უკანასკნელის გათვალისწინებით სისტემის კინეტიკური ენერგია საბოლოოდ დებულობს შემდეგ სახეს

$$K = \frac{1}{2} m \sum \omega_k^2 (2a_k a_k^* - a_k a_{-k} - a_k^* a_{-k}^*). \quad (2.47)$$

აქ გამოყენებულია აგრეთვე თანაფარდობა $a_k = a_{-k}$, რომელიც უშუალოდ მიიღება (2.46) ფორმულიდან.

სრულიად ანალოგიურად გარდაქმნები პოტენციალური ენერგიისათვის გვაძლევს

$$U = \frac{1}{2} m \sum \omega_k^2 (2a_k a_k^* + a_k a_{-k} + a_k^* a_{-k}^*). \quad (2.48)$$

ამიტომ სრული ენერგიისათვის გვექნება

$$E = T + U = 2m \sum \omega_k^2 a_k a_k^*. \quad (2.49)$$

შემოვიტანოთ არსი x_k და p_k სიდიდეები შემდეგი სახით:

$$x_k = a_k + a_k^* = 2R_e\{a_k\} \quad (2.50)$$

$$\text{და } p_k = \frac{m\omega_k}{i} (a_k - a_k^*) = \frac{m\omega_k}{i} 2Jm\{a_k\}.$$

¹ განვიხილოთ გეომეტრიული პროგრესია

$$\sum_1^N e^{i\frac{2\pi}{N}gn} = e^{i\frac{2\pi}{N}g} + e^{i\frac{4\pi}{N}g} + \dots + e^{i\frac{2\pi}{N}gN} = e^{i\frac{2\pi}{N}g} \frac{(e^{2\pi g} - 1)}{e^{i\frac{2\pi}{N}g} - 1}.$$

როდესაც $g \neq 0$, მაშინ $e^{i\frac{2\pi}{N}g} \neq 0$, და $e^{i2\pi g} = 1$, ამიტომ აღნიშნული ჯამი ნულის ტოლია, როდესაც $g=0$, მაშინ ჯამის ყოველი წევრი უდრის ერთს, ამიტომ

$$\sum_1^N e^{i\frac{2\pi}{N}gn} = N.$$

აქედან

$$a_k = \frac{1}{2} \left(x_k + i \frac{p_k}{m\omega_k} \right) \text{ და } a_k^* = \frac{1}{2} \left(x_k - i \frac{p_k}{m\omega_k} \right).$$

a_k და a_k^* სიდიდეების ჩასმა (2.49)-ში გვაძლევს:

$$E = \sum_k \left\{ \frac{1}{2m} p_k^2 + \frac{1}{2} m\omega_k^2 x_k^2 \right\} = H(x_k, p_k) \quad (2.51)$$

ჩამის ქვეშ მდგომი პირველი წევრი წარმოადგენს წრფივი ოსცილატორის კინეტიკურ, ხოლო მეორე—პოტენციალურ ენერგიას. მთელი სისტემის ენერგია კი—დამოუკიდებელი წრფივი ოსცილატორების ენერგიათა ჯამს. არსი სიდიდეები x_k და p_k ასრულებენ განზოგადებული კოორდინატისა (ნორმალური კოორდინატების) და მისი შეუღლებული იმპულსების როლს. $H(x_k, p_k)$ არის ჰამილტონის ფუნქცია აღებულ ცვლადებში.

5. მარტივი სამგანზომილებიანი კრისტალის სიხშირეთა სპექტრის გამოკვლევა დიფაზის მეთოდით

როგორც ზემოთ აღენიშნეთ, გრძელი ტალღების შემთხვევაში სხეულის სტრუქტურა შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ და განვიხილოთ იგი როგორც უწყვეტი გარემო. ეს დასკვნა, რომელიც მივიღეთ ერთგანზომილებიანი ატომთა მწყკრივის ანალიზური განხილვიდან, ცხადია, ძალაში რჩება აგრეთვე სამგანზომილებიანი კრისტალისათვისაც. მაქროსკოპიულ თეორიაში უწყვეტ გარემოში აღძრული დრეკადი ტალღების გავრცელება აიწერება შემდეგი დიფერენციალური განტოლებით:

$$\Delta \xi = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2}, \quad (2.52)$$

სადაც v არის დრეკადი ტალღების გავრცელების სიჩქარე. ცნობილია, რომ მყარ სხეულში ტალღურ ვექტორ k -ს ერთ გარკვეულ მნიშვნელობას ეთანადება სამი ტალღა: ერთი სიგრძივი და ორი განივი. ორივე მათგანი აიწერება (2.52) განტოლებით, სადაც $v = v_{\parallel}$ -ს სიგრძივი ტალღებისათვის და $v = v_{\perp}$ -ს განივი ტალღებისათვის.

ვინაიდან უწყვეტი გარემოს თავისუფლების ხარისხი უსასრულოდ დიდია, ამიტომ (2.52) განტოლების ამოხსნა გვაძლევს ნორმალური რხევების უსასრულო რიცხვს, რომელთა ტალღის სიგრძე მოთავსებულია $\lambda = 0$ და $\lambda = \lambda_{max}$. შორის. როგორც ქვემოთ დავინახავთ, λ_{max} განისაზღვრება მოცემული სხეულის გეომეტრიული ზომით. ვინაიდან სხეულის ატომური სტრუქტურის უგულებელყოფა სამართლიანია მხოლოდ გრძე-

ლი ტალღების მიმართ, ამიტომ ზემოთ აღნიშნული უსასრულო ამოხსნებიდან უნდა ავირჩიოთ გრძელი ტალღების ისეთი რაოდენობა, რომ მათი რიცხვი უდრიდეს მოცემული სხეულის თავისუფლების ხარისხს, ე. ი.

$$\int_0^{v_{max}} f(v) dv = 3N, \quad (2.53)$$

სადაც N არის ატომების რიცხვი სხეულში, v_{max} სიხშირის ზედა ზღვარი (ანდა λ -ს ქვედა საზღვარი), რომელზედაც ხდება სიხშირეთა სპექტრის ჩამოკრა. მეორე მხრივ, როგორც ერთგანზომილებიანი ატომთა მწყობრის შემთხვევაში ვუჩვენებთ, სიხშირის ზედა ზღვარის ანდა λ -ს ქვედა ზღვარის ($\lambda_{min} = 2a$) არსებობა დამახასიათებელია დისკრეტული განაწილები-სათვის საერთოდ.

გამოთვლების გამარტივების მიზნით, განვიხილოთ კუბური ფორმის მარტივი (ერთატომიანი) მყარი სხეული. აღვნიშნოთ ამ კუბის წახნაგთა სიგრძეები A , B , C -თი. ვინაიდან სიგრძივი და განივი ტალღების გავრცელება მყარ სხეულში აიწერება ერთი და იგივე ტიპის დიფერენციალური განტოლებით (2.52), ამიტომ სიხშირეთა სპექტრის გამოსარკვევად საკმარისია განვიხილოთ ერთ-ერთი, მაგალითად სიგრძივი ტალღების გავრცელების განტოლება

$$\Delta \xi = \frac{1}{v_l^2} \frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2}. \quad (2.53)$$

სასაზღვრო პირობად შეგვიძლია ავიღოთ ბორნ-კარმანის პერიოდულობის პირობა, ანდა პირობა $\xi = 0$ კუბის წახნაგებზე. ამ უკანასკნელ პირობას აკმაყოფილებს მდგარი ტალღა, რომელიც მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$\xi = \text{const} \cdot \sin \frac{\pi m}{A} x \cdot \sin \frac{\pi n}{B} y \cdot \sin \frac{\pi p}{C} z \cdot \sin(2\pi \nu t + \delta), \quad (2.54)$$

სადაც m , n და p მთელი დადებითი რიცხვებია. (2.54) ფუნქციის ჩასმა (2.53) განტოლებაში გვაძლევს

$$\nu = \nu_{m,n,p} = v_l \cdot \sqrt{\left(\frac{m}{2A}\right)^2 + \left(\frac{n}{2B}\right)^2 + \left(\frac{p}{2C}\right)^2},$$

ტალღური ვექტორი

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi \nu}{v_l} = \frac{\omega}{v_l} = \sqrt{\left(\frac{\pi m}{A}\right)^2 + \left(\frac{\pi n}{B}\right)^2 + \left(\frac{\pi p}{C}\right)^2}, \quad (2.55)$$

სადაც

$$k_x = \frac{\pi m}{A}, \quad k_y = \frac{\pi n}{B} \quad \text{და} \quad k_z = \frac{\pi p}{C}.$$

რადგანაც m , n და p რიცხვები მთელი დადებითია, ამიტომ k_x , k_y და k_z სიდიდეების მინიმალური შესაძლო მნიშვნელობები იქნება

$$\begin{aligned}(\Delta k_x)_{\min} &= \frac{\pi(m+1)}{A} - \frac{\pi m}{A} = \frac{\pi}{A}, \\(\Delta k_y)_{\min} &= \frac{\pi(n+1)}{B} - \frac{\pi n}{B} = \frac{\pi}{B}, \\(\Delta k_z)_{\min} &= \frac{\pi(p+1)}{C} - \frac{\pi p}{C} = \frac{\pi}{C}.\end{aligned}\quad (2.56)$$

თანხმად (2.56) დამოკიდებულებისა, უსასრულო ზომის სხეულთა შემთხვევაში

$$A = B = C = \infty, \text{ ამიტომ } (\Delta k_x)_{\min} = (\Delta k_y)_{\min} = (\Delta k_z)_{\min} = 0,$$

ე. ი. ტალღურა ვექტორი k ღებულობს უწყვეტ მნიშვნელობებს, რაც საესებით გასაგებია.

(2.55) განტოლება შეიძლება გადმოვწეროთ შემდეგი სახით:

$$\frac{m^2}{\left(\frac{2A\nu}{v_t}\right)^2} + \frac{n^2}{\left(\frac{2B\nu}{v_t}\right)^2} + \frac{p^2}{\left(\frac{2C\nu}{v_t}\right)^2} = 1. \quad (2.57)$$

m , n , p რიცხვების გარკვეულ მთელ დადებით მნიშვნელობას შეესაბამება ერთი რხევა. ამიტომ, თუ ამ რიცხვებს მიმდინარე კოორდინატებად მივიღებთ, მაშინ (2.57) იქნება ელიფსოიდის განტოლება, რომლის ნახევარი ღერძებია:

$$\frac{2A\nu}{v_t}, \quad \frac{2B\nu}{v_t} \quad \text{და} \quad \frac{2C\nu}{v_t}.$$

ამ ელიფსოიდის მოცულობის $1/8$, რომელიც ეთანადება m , n , p რიცხვების მთელ დადებით მნიშვნელობებს, გვაძლევს რხევათა რიცხვს, რომელთა სიხშირე $\nu \leq \nu_{m,n,p}$.

ამრიგად

$$Z_\nu = \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{2A\nu}{v_t} \cdot \frac{2B\nu}{v_t} \cdot \frac{2C\nu}{v_t} = V \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\nu}{v_t}\right)^3. \quad (2.58)$$

თუ შემოვიტანთ ტალღურ ვექტორს $k' = \frac{k}{2\pi} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{v_t}$, მაშინ, ნაცვლად (2.58) გვექნება:

$$Z_{k'} = V \cdot \frac{4\pi}{3} k'^3. \quad (2.58a)$$

მაშასადამე, სხეულის V მოცულობაში რხევათა რიცხვი, რომელთა ტალღური ვექტორი $\leq k'$, უდრის k' რადიუსის სფეროს (ტალღური ვექტორის სივრცეში) მოცულობას. (2.58)-ის დიფერენცირების გზით მივიღებთ

$$dx_k = 4\pi V k'^2 dk'. \quad (2.59)$$

ეს უკანასკნელი გვაძლევს რხევათა რიცხვს სხეულის V მოცულობაში, რომელთა ტალღური ვექტორი მოთავსებულია k' და $k' + dk'$ შორის, სიდიდე

$$dx_k = V dk'_x dk'_y dk'_z \quad (2.60)$$

გვაძლევს რხევათა რიცხვს, რომელთა ტალღური ვექტორი მოთავსებულია შემდეგ ინტერვალებში:

$$k'_x, k'_x + dx'_x, \quad k'_y, k'_y + dx'_y, \quad \text{და} \quad k'_z, k'_z + dk'_z.$$

სრულიად ასეთივე სახით იწერება კლასიკურ სტატისტიკაში მოლეკულათა (ნაწილაკთა) რიცხვი გაზის V მოცულობაში, რომელთა იმპულსი მოთავსებულია

$$p_x, p_x + dp_x, \quad p_y, p_y + dp_y, \quad p_z, p_z + dp_z \text{-ს შორის} \\ dN = V dp_x dp_y dp_z. \quad (2.61)$$

ტალღასა და ნაწილაკს შორის ეს ანალოგია, რომელიც კვანტური მექანიკის ერთ-ერთ ძირითად პრინციპს წარმოადგენს, საშუალებას იძლევა მყარ სხეულში წარმოშობილ k' ტალღური ვექტორის ტალღას შეგუსაბამოთ ჰიპოტეტური ნაწილაკი—ფონონი (სითბური კვანტი). მაშასადამე, მყარ სხეულში სითბურ რხევებს შეიძლება შევუსაბამოთ ფონონური გაზი. ასეთივე ანალოგია გვაქვს სინათლის კვანტებისათვის — ფოტონებისათვის.

ფონონებისათვის გვექნება (ისე როგორც ფოტონებისათვის)

$$E = \hbar \nu = \hbar \omega \quad \text{და} \quad p = \hbar k' = \hbar k \quad (2.62)$$

ჩვენ დავადგინეთ სიხშირეთა სპექტრი სივრცითი ტალღებისათვის (2.53) განტოლების ამოხსნით. სრულიად ანალოგიურ შედეგს მივიღებთ განივი ტალღებისათვის. ამ შემთხვევაში ტალღური ვექტორის ერთ გარკვეულ მნიშვნელობას მყარ სხეულში ეთანადება ორი განივი ტალღა, რომელიც ვრცელდება ერთი და იგივე v_e სიჩქარით. მაშასადამე, რხევათა (ტალღათა) საერთო რიცხვი, რომელთა სიხშირე $\leq \nu$ განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით

$$dx_\nu = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right) \nu^2 d\nu = f(\nu) d\nu, \quad (2.63)$$

სადაც

$$f(\nu) = 4\pi V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3} \right). \quad (2.64)$$

$f(\nu)$ წარმოადგენს სიხშირეთა განაწილების ფუნქციას კონტინუუმისათვის. დეზაის მიხედვით სიხშირის ზედა ზღვარი (ანდა λ_{min}) განისაზღვრება შემდეგი პირობიდან

$$\int_0^{\nu_m} f(\nu) d\nu = 3N, \quad (2.16)$$

სადაც $3N$ არის როგორც სიგრძე, ისე განივი რხევათა საერთო რიცხვი, რომელიც უდრის N ნაწილაკისაგან შემდგარი მყარი სხეულის თავისუფლების ხარისხს. თუ (2.16) ფორმულაში შევიტანთ $f(\nu)$ -ის მნიშვნელობას მოცემულს (2.64) ფორმულით, მივიღებთ

$$\frac{4\pi}{3} V \left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_s^3} \right) \nu_m^3 = 3N. \quad (2.65)$$

(2.64) და (2.68) ფორმულების შედარება გვაძლევს

$$f(\nu) d\nu = \frac{9N}{\nu_m^3} \nu^2 d\nu. \quad (2.66)$$

ეს უკანასკნელი დეზაის სიხშირეთა განაწილების კანონია

§ 6. მარტივი მყარი სხეულების სითბოტევადობა დეზაის მიხედვით

წინა პარაგრაფში ჩვენ დავამტკიცეთ, რომ კვაზი-დრეკადი ძალებით დაკავშირებული ნაწილაკთა სისტემა მექანიკური თვალსაზრისით ეკვივალენტურია $3N$ წრფივი ოსცილატორებისა. აინშტაინის სითბოტევადობის თეორიაში ეს ოსცილატორები ეთანადებიან ცალკეული ატომების დამოუკიდებელ რხევებს, რის გამოც აინშტაინმა ამ ოსცილატორებს ერთი და იგივე სიხშირე მიუწერა. დეზაის თეორიაში ეს ოსცილატორები ეთანადებიან სისტემის ნორმალურ რხევებს, რომელთა სიხშირე მოცემულია (2.66) კანონით. ვინაიდან კვანტური თეორიის თანახმად, ν სიხშირის ოსცილატორს ეთანადება საშუალო ენერგია

$$\overline{E} = \frac{h\nu}{e^{kT} - 1},$$

ამიტომ სხეულის სრული ენერგიისათვის გვექნება:

$$E = \int_0^{\nu_m} \overline{E} f(\nu) d\nu = \frac{9Nh}{\nu_m^3} \int_0^{\nu_m} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{kT} - 1}.$$

$$x = \frac{h\nu}{kT},$$

მაშინ

$$x_{max} = u = \frac{h\nu_m}{kT} = \frac{\theta}{T},$$

სადაც

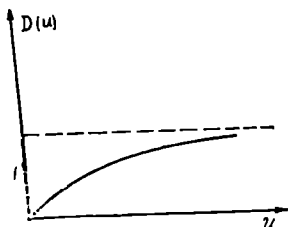
$$\theta = \frac{h\nu_m}{k}. \quad (2.67)$$

θ -ს ეწოდება დეზაის ტემპერატურა. იგი ეთანადება მყარ სხეულში შესაძლო მაქსიმალურ სიხშირეს (დეზაის მიხედვით). ამ აღნიშვნის თანახმად, სხეულის სრული ენერგიისათვის მივიღებთ შემდეგ ფორმულას:

$$E = 3NkT \cdot D(u), \quad (2.68)$$

სადაც

$$D(u) = \frac{3}{u^3} \int_0^u \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (2.69)$$



ნახ. 23.

D -ს ეწოდება დეზაის ფუნქცია. მისი გრაფიკი ნაჩვენებია ნახ. 23-ზე. სითბო-

ტევადობისათვის მიიღება:

$$C_v = \frac{dE}{dT} = 3Nkf_D(u), \quad (2.70)$$

სადაც

$$f_D(u) = \frac{3}{u^3} \int_0^u \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (2.71)$$

$f_D(u)$ -ს ეწოდება სითბოტევადობის დეზაის ფუნქცია.

გავარჩიოთ მიღებული ფორმულის ორი კერძო შემთხვევა:

ა) მაღალ ტემპერატურაზე

$$u = \frac{h\nu_m}{kT} = \frac{\theta}{T} \ll 1, \quad \text{ე. ი. } T \gg \theta,$$

მეორე მხრივ, $x = \frac{h\nu}{kT}$ და $x_{max} = u$.

მაგრამ, რადგანაც $u \ll 1$, ამიტომ ინტეგრირების მთელ არეში გვექნება $x \ll 1$. ეს გარემოება საშუალებას გვაძლევს e^x დავშალოთ მწკრივად x -ს ხარისხებად, ეს გვაძლევს:

$$D(u) = \frac{3}{u^3} \int_0^u \frac{x^2 dx}{1 + \frac{1}{2!}x + \frac{1}{3!}x^2 + \dots} = \frac{3}{u^3} \int_0^u x^2 \left(1 - \frac{1}{2}x + \frac{1}{12}x^2 + \dots \right) dx$$

$$= 1 - \frac{3}{8}u + \frac{1}{20} \cdot u^2 + \dots = 1 - \frac{3}{8} \left(\frac{\theta}{T} \right) + \frac{1}{20} \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 + \dots$$

მაშასადამე

$$E = 3NkT \left\{ 1 - \frac{3}{8} \left(\frac{\theta}{T} \right) + \frac{1}{20} \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 + \dots \right\} = \text{const} +$$

$$+ 3NkT \left(1 + \frac{1}{20} \left(\frac{\theta}{T} \right)^2 + \dots \right)$$

ძალიან მაღალ ტემპერატურაზე $T \gg \theta$ ვლებულობთ კლასიკურ შედეგს

$$E = \text{const} + 3NkT.$$

შესაბამისად ამისა, სითბოტევადობისათვის მიიღება კლასიკური შედეგი

$$C_V \simeq 3Nk$$

ბ) დაბალი ტემპერატურა $T \ll \theta$.

$$\text{ვინაიდან } u = \frac{h\nu_m}{KT} = \frac{\theta}{T} \gg 1,$$

ამიტომ უმჯობესია $D(u)$ წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$D(u) = \frac{3}{u^3} \left(\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} - \int_u^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \right).$$

პირველი ინტეგრალის მნიშვნელობა ცნობილია

$$\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^4}{15},$$

ხოლო, რაც შეეხება მეორე ინტეგრალს, აქ ინტეგრირების არეში ყველგან $x > 1$, ამიტომ ეს ინტეგრალი გამოითვლება მიახლოებით ინტეგრალქვეშა სიდიდის e^{-x} -ს ხარისხებად დაშლის გზით.

$$\int_u^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_u^\infty x^3 e^{-x} (1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots) dx = (6 + 6u + 3u^2 + u^3)e^{-u} +$$

$$+ (\dots)e^{-2u} + \dots$$

ვინაიდან u დიდი რიცხვია, ამ ინტეგრალის მნიშვნელობა შეიძლება უგულებელვყოთ, ამრიგად

$$E = \text{const} + 3NkT \left(\frac{3\pi^4}{15} \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 + \dots \right) = \text{const} + aT^4,$$

სადაც

$$a = \frac{3}{5} \pi^4 \frac{Nk}{\theta^3}.$$

სითბოტევადობისათვის გვექნება

$$C_V = \frac{dE}{dT} = bT^3, \text{ სადაც } b = 4a.$$

ამ კანონს დეზაის კანონს უწოდებენ.

დეზაის თეორიის შედარება ექსპერიმენტთან

დეზაის ფორმულაში უცნობის სახით შედის პარამეტრი θ . ამ პარამეტრის არჩევენ ისე, რომ სითბოტევადობის თეორიული მნიშვნელობები რაც შეიძლება ახლოს იყოს ექსპერიმენტულ მნიშვნელობებთან. ასეთნაირად განსაზღვრულ θ -ს შეიძლება ვუწოდოთ ექსპერიმენტული მნიშვნელობა. მე-2 ცხრილში მოცემულია ზოგიერთი ნივთიერებისათვის მკვს. მნიშვნელობები.

ცხრილი 2

ნივთ.	Na	K	Ca	Ag	Au	ed	Hg	Al	Ln
$\theta \sim T^3$	150	100	315	275	170	172	98	390	100

თეორიული მნიშვნელობა θ -სი განისაზღვრება $\theta = \frac{\hbar \nu_m}{k}$ ფორმუ-

ლიდან, სადაც უნდა ჩაისვას ν_m მნიშვნელობა (2.65) ფორმულიდან, ეს გვაძლევს

$$\theta = \frac{\hbar \nu_m}{k} = \frac{\hbar}{k} \left(\frac{9N}{4\pi V} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_e^3} \right)^{1/3}}. \quad (2.72)$$

დრეკადი ტალღების გავრცელების სიჩქარე v_l და v_e დამოკიდებული არიან დრეკად მოძულებზე, უკანასკნელნი კი, ტემპერატურის ფუნქციაა. მაშასადამე, θ -ს ტემპერატურის ფუნქციაა. ბორნმა და კარმანმა გამოთვალეს θ -ს მნიშვნელობა. Ag და Ru -ის θ -ს გამოთვლის დროს ისარგებლეს დრეკადი მუდმივების იმ მნიშვნელობებით, რომელიც ცნობილი იყო ოთახის ტემპერატურაზე და ამრიგად მიღებული θ კარგად ემთხვევა ექსპერიმენტულ მნიშვნელობებს. მაგრამ, ვინაიდან დეზაის კანონი ეხება დაბალ ტემპერატურებს, ამიტომ ბუნებრივია, თეორიულ და ექსპერიმენტულ

მნიშვნელობათა შედარებისათვის θ (თეორიული) უნდა გამოგვეთვალა ღრეკადი მუდმივების იმ მნიშვნელობებით, რომლებიც ეთანადება დაბალ ტემპერატურებს. ასეთი შედარება გვიჩვენებს, რომ $\theta_{\text{თეორ.}} > \theta_{\text{ქს.}}$ (იხ. ცხრილი 3). როგორც ამ ცხრილიდან ჩანს, დებაის თეორიასა და ექსპერიმენტს შორის დამთხვევა ცუდია იმ ტემპერატურაზე, როცა მოსალოდნელი იყო უფრო კარგი დამთხვევა ექსპერიმენტთან. აქედან დასკვნა: ზემოთ აღნიშნული კარგი დამთხვევა დებაის თეორიასა და ექსპერიმენტს შორის შეიძლება ჩაითვალოს როგორც შემთხვევითი მოვლენა.

ც ხ რ ი ლ ი 3

ნივთ.	$\theta_{\text{ქს.}}$	$\theta_{\text{თეორ.}}$
Cu	329	358
Ag	312	241
Al	339	502

მიუხედავად იმისა, რომ აინშტაინისა და დებაის სითბოტევადობის თეორიებში სიხშირეთა განაწილების კანონი რადიკალურად განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან, ისინი იძლევიან ერთნაირ შედეგებს, გარდა ძალიან დაბალი ტემპერატურისა. ეს მიუთითებს იმაზე, რომ სხეულის სითბური თვისებები ნაკლებად მგრძნობიარეა სიხშირეთა განაწილების კანონის მიმართ. მხოლოდ ძალიან დაბალი ტემპერატურის არეში არსებითი მნიშვნელობა ენიჭება სიხშირეთა განაწილების დეტალურ გამოკვლევას. ის გარემოება, რომ დაბალ ტემპერატურაზე დებაის კანონი არ იძლევა ექსპერიმენტებთან კარგ დამთხვევას, შეიძლება გაგებულ იქნეს შემდეგნაირად: როგორც ვიცით, დებაის მეთოდი ეყრდნობა სხეულის კონტინიუმის დაშვებას, ე. ი. სხეულის მოლეკულური სტრუქტურის უგულებელყოფას. სხეულის მოლეკულური სტრუქტურა ფორმალურად გათვალისწინებულია იმით, რომ კონტინიუმის უსასრულო ნორმალური რხევებიდან შერჩეულ იქნა $3N$ ნორმალური რხევები ყოველი მოცემული სხეულისათვის სიხშირის ზედა ზღვარის ν_m -ის დადგენით. ადვილი საჩვენებელია, რომ სიხშირის ამ ზედა ზღვარს ეთანადება მინიმალური ტალღის სიგრძე $\lambda_{min} \approx 2a$ -ს. სადაც a არის მეზობელ ატომებს შორის მანძილი. მაშასადამე, ამ სიხშირის მაქსიმალური სიხშირეებისათვის, რომლებსაც შეაქვთ სათანადო წვლილი სითბოტევადობაში, სხეული არ შეიძლება განხილული იქნეს კონტინიუმის სახით და, მაშასადამე, სიხშირეთა აღნიშნული მნიშვნელობებისათვის დებაის თეორია უეარგისი ხდება. ის გარემოება, რომ დაბალ ტემპერატურებზე ცუდად სრულდება დებაის კანონი, უნდა აიხსნას იმით, რომ ასეთ ტემპერატურებზე სითბოტევადობაზე არსებითი წვლილი შეაქვთ ალბათ მაღალი სიხშირის რხევებს, რომელთა მიმართ სხეულის განხილვა კონტინიუმის სახით შეუძლებელია. ეს გარემოება მიგვითითებს იმაზე, რომ დაბალი ტემპერატურების არეში აუცილებელია სიხშირეთა სპექტრის დეტალური გამოკვლევა სხეულის ატომურ სტრუქტურაზე დაყრდნობით

ასეთი გამოკვლევები ჩატარებულ იქნა სამგანზომილებიანი სხეულისათვის. ბორნის, ბლექმენის და სხვების მიერ.

§ 7. რთული შემთხვევის ნორმალური რხევები

რთული მესერის შემთხვევაში ელემენტარულ უჯრედზე მოდის ერთ-ზე მეტი ნაწილაკი. ამ შემთხვევაში სიხშირეთა სპექტრი იყოფა ორ ჯგუფად: პირველი ეთანადება მოლეკულის, როგორც მთლიანის რხევას და ეწოდება აკუსტიკური რხევები, მეორე ეთანადება მოლეკულის შიგნით ატომების რხევებს, ისინი მაღალი სიხშირისანი არიან და მნიშვნელოვან გავლენას ახდენენ სხეულის ოპტიკურ თვისებებზე, ამიტომ მათ ოპტიკურ რხევებს უწოდებენ. სიმარტივისათვის განვიხილოთ ერთგანზომილებიანი მესერი და ვიგულისხმობთ, რომ ელემენტარულ უჯრედზე მოდის M და m მასის ორი ნაწილაკი (ნახ. 24).



ნახ. 24.

თითოეული ტიპის ატომთა რიცხვი იყოს N , ხოლო მეზობელ ატომებს შორის მანძილი a . ისე როგორც წინა მკვლელობაში, დავუშვათ, რომ ატომებს შორის მოქმედებენ დრეკადი ძალები

$$F_{n,n-1} = -\alpha(\xi_n - \xi_{n-1}).$$

თუ დავუშვებთ, რომ ყოველი ატომი განიცდის მოქმედებას მხოლოდ ორი უახლოესი მეზობელი ატომისა, მაშინ m და M მასის ატომების მოძრაობის განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\begin{aligned} m\ddot{\xi}_{2n} &= -\alpha(2\xi_{2n} - \xi_{2n+1} - \xi_{2n-1}) \\ M\ddot{\xi}_{2n+1} &= -\alpha(2\xi_{2n+1} - \xi_{2n} - \xi_{2n+2}), \end{aligned} \quad (2.73)$$

სადაც ξ_{2n} აღნიშნავს წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის მანძილს m მასის ატომებისათვის, ხოლო $\xi_{2n+1} - M$ მასის ატომებისათვის. (2.73) განტოლებათა სისტემის ამოხსნას ვეძებთ გამრბენი ტალღების სახით, რომელიც აკმაყოფილებს ბორნი-კარმანის პერიოდულობის პირობას, ასეთია შემდეგი ამოხსნები.

$$\xi_{2n} = B e^{2\pi i \left(\frac{2n}{2N} l - \nu t \right)}, \quad (2.74)$$

$$\xi_{2n+1} = A e^{2\pi i \left(\frac{2n+1}{2N} l - \nu t \right)}.$$

(2.74)-ის ჩასმა (2.73) განტოლებებში გვაძლევს A და B კოეფიციენტებისათვის ორ ერთგვაროვან განტოლებას:

$$(4\pi^2 m v^2 - 2\alpha) B + 2\alpha \cos \frac{\pi l}{N} \cdot A = 0, \quad (2.75)$$

$$2\alpha \cos \frac{\pi l}{N} \cdot B + (4\pi^2 M v^2 - 2\alpha) A = 0.$$

ამ განტოლებათა შეთავსებისათვის საჭიროა სისტემის დეტერმინანტი ნულის ტოლი იყოს

$$\begin{vmatrix} 4\pi^2 m v^2 - 2\alpha, & 2\alpha \cos \frac{\pi l}{N} \\ 2\alpha \cos \frac{\pi l}{N}, & 4\pi^2 M v^2 - 2\alpha \end{vmatrix} = 0.$$

აქედან ვღებულობთ

$$4\pi^2 v^2 = \omega^2 = \frac{\alpha}{Mm} \left(M + m \pm \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \frac{2\pi l}{N}} \right) \quad (2.76)$$

$$l = 1, 2, \dots, 2N.$$

l -ის ყოველ მნიშვნელობას ეთანადება v^2 -ის ორი მნიშვნელობა. ამრიგად მიიღება სულ $4N$ ნორმალური რხევები. მეორე მხრივ, სისტემის თავისუფლების ხარისხი უდრის $2N$ -ს. აღვილი საჩვენებელია, რომ მიღებული $4N$ ნორმალური რხევებიდან დამოკიდებულია სულ $2N$ რხევა. ისინი მაილებიან (2.76)-დან, თუ l -ს მივცემთ მნიშვნელობებს $1, 2, \dots, N$. ამრიგად, მივიღებთ სიხშირეთა ორ შტოს

$$4\pi^2 v_1^2 = \frac{\alpha}{Mm} \left(M + m - \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \frac{2\pi l}{N}} \right) \quad (2.77)$$

და

$$4\pi^2 v_2^2 = \frac{\alpha}{Mm} \left(M + m + \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \frac{2\pi l}{N}} \right). \quad (2.78)$$

თუ v_1^2 და v_2^2 ამ მნიშვნელობებს შევიტანთ (2.75) განტოლებაში, მაშინ ამპლიტუდების შეფარდებისათვის მივიღებთ:

$$\frac{A}{B} = \frac{2M \cos \frac{\pi l}{N}}{M - m \pm \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos \frac{2\pi l}{N}}}. \quad (2.79)$$

აქ მნიშვნელში (+) ნიშანი ეთანადება პირველ შტოს $v_1(k)$ -ს, ხოლო ნიშანი (—) — მეორე შტოს $v_2(k)$ -ს. გავარჩიოთ თითოეულ შტოში სიხშირის დამოკიდებულება ტალღური ვექტორისაგან. ამისათვის განვიხილოთ გრძელი ტალღების შემთხვევა $l \rightarrow 0$ (ანდა $\varphi \rightarrow 0$, სადაც φ არის მეზობელ ატომებს შორის ფაზათა სხვაობა). ამ დროს (2.77) ფორმულაში კვადრატული ფესვის ქვეშ მდგომი გამოსახულება შეიძლება დავშალოთ მწკრივად. ეს გვაძლევს:

პირველი შტოსათვის

$$v_1 = \frac{2}{2\pi} \sqrt{\frac{2\alpha}{M+m} \sin \frac{\pi l}{N}} \rightarrow 0, \text{ როდესაც } l \rightarrow 0, \quad (2.80)$$

$$A = B$$

მეორე შტოსათვის

$$v_2 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{Mm} \left(2(M+m) - \frac{2Mm}{M+m} \sin^2 \frac{\pi l}{N} \right)} \quad (2.81)$$

$$\frac{A}{B} = -\frac{M}{m} \text{ ანდა } Am = BM \cdot e^{i\pi}.$$

თანხმად (2.81) დამოკიდებულებისა, როდესაც $l \rightarrow 0$ სიხშირე v_2 მიისწრაფვის თავისი მაქსიმალური მნიშვნელობისაკენ

$$v_2 = v_{\max} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\alpha(M+m)}{Mm}}, \quad (2.82)$$

მაშასადამე, სიხშირეთა პირველი შტოსათვის სიხშირის დამოკიდებულება ტალღური ვექტორისაგან ზუსტად ისეთია, როგორც დებაის თეორიაში, ე. ი. კონტინიუმის შემთხვევაში. გარდა ამისა, უკრედში მოთავსებული ორივე ატომი ერთი და იგივე ფაზებით ირხევა ($A = B$). ამის გამო, ამ რხევების მიმართ ბორნი განიხილავს სხეულს როგორც კონტინიუმს. სულ სხვა სურათი გვაქვს სიხშირეთა მეორე შტოში. აქ $l \rightarrow 0$ შემთხვევაში სიხშირე ნულისაგან არ მიისწრაფვის, არამედ ღებულობს მაქსიმალურ მნიშვნელობას. სიხშირეთა ამ შტოსათვის დამახასიათებელია ის, რომ უკრედში მოთავსებული ნაწილაკები ირხებიან ერთმანეთის საწინააღმდეგო ფაზებით ($\frac{A}{B} = -\frac{M}{m}$). რაც დამახასიათებელია მოლეკულაში

შემაჯალი ატომების ურთიერთსაწინააღმდეგო მიმართულებით რხევებისათვის. ისინი მაღალი სიხშირისაა და არსებითად განსხვავდებიან დებაის სიხშირისაგან. მათ მიმართ სხეულის კონტინიუმის სახით განხილვა შეუძლებელია. სიხშირეთა პირველ შტოს უწოდებენ დებაის შტოს, რომელიც

$\lambda \gg a$ შემთხვევაში გადადის აკუსტიკურ რხევებში. მეორე შტოს უწოდებენ ოპტიკურ რხევებს (შტოს). ეს სახელწოდება დაკავშირებულია იმასთან, რომ, თუ ატომებს ელექტრული მუხტი გააჩნიათ, მაშინ მათი რხევა საწინააღმდეგო დაზეგბათ წარმოშობს ძლიერ ელექტრომაგნიტურ ველს, რომელიც მნიშვნელოვან გავლენას ახდენს სხეულის ოპტიკურ თვისებებზე, სიხშირეთა ორივე შტოს გრაფიკი მოცემულია ნახ. 25-ზე. ბრილუენის ზონის საზღვარზე გვექნება

$$v_1 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\alpha}{m}}, \quad (2.83)$$

და

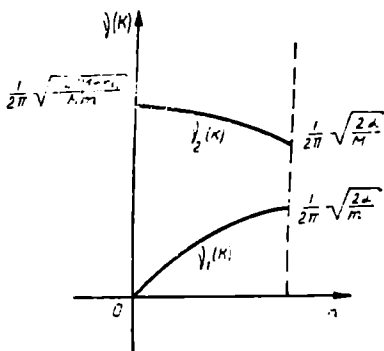
$$v_2 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2\alpha}{M}}.$$

ანალოგიური გამოკვლევები ჩატარებულ იქნა სამგანზომილებიანი კრისტალებისათვის. მიღებული შედეგი ასეთია:

თუ მოლეკულაში ატომების რიცხვი არის n , მაშინ სისტემის თავისუფლების ხარისხი იქნება $3Nn$. ასეთი სისტემის უმოდრაობა აღიწერება $3N$ დიფერენციალური განტოლებით. ამ განტოლებათა სისტემის ამოხსნას ვეძებთ გამრბენი ტალღების საშუალებით, რომელთა კოეფიციენტებია $A, B, C \dots$

აღნიშნული კოეფიციენტებისათვის მიიღება $3n$ ერთგვაროვანი განტოლებათა სისტემა, რომელთა თავსებადობა გვაძლევს v^2 -თვის $3n$ რიგის დეტერმინანტულ განტოლებას. მათი ამოხსნა v^2 -ის მიმართ გვაძლევს $3n$ სიხშირეთა შტოს. აქედან სამ შტოში (ე. ი. $3N$ ნორმალური რხევები) სიხშირის დამოკიდებულება ტალღური ვექტორისაგან ისეთია, როგორც კონტინუუმის შემთხვევაში და $\lambda \gg a$ შემთხვევაში გადადიან აკუსტიკურ რხევებში, ამიტომ სათანადო წვლილი სითბოტევადობაში აღებულ იქნა დებაის თეორიის მიხედვით, დანარჩენები $3(n-1)$ შტო ანდა $3(n-1)N$ ნორმალური კოორდინატები ეთანადება შიდამოლეკულურ რხევებს. ის მაღალი სიხშირისაა და გარდა ამისა ტალღური ვექტორისაგან თითქმის დამოუკიდებელია, ისე როგორც აინშტაინის თეორიაში. ამიტომ ბორნმა სითბოტევადობის სათანადო წვლილი აიღო აინშტაინის ფორმულის მიხედვით. მაშასადამე, კრისტალის ერთი გრამმოლისათვის სითბოტევადობა

$$C_v = R(3f_D + 3(n-1)f_E). \quad (2.84)$$



ნახ. 25.

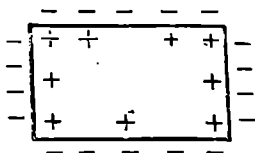
ცხადია, ბორნის თეორია უფრო სრულია, ვიდრე ღებაის, ვინაიდან ღებაის თეორია ეხება მარტივ ერთგანზომილებიან მყარ სხეულს, ბორნის თეორია კი—მრავალატომიანი მოლეკულებისაგან შემდგარ მყარ სხეულს. ამიტომ ცხადია, ბორნის თეორია უფრო კარგად ემთხვევა ექსპერიმენტს. მაგრამ, ძალიან დაბალ ტემპერატურაზე, მაგალითად, $T=4,3^{\circ}\text{K}$ HCl -ის შემთხვევაში სითბოტევადობის მრუდზე შემჩნეულია პიკები, რომელთა ახსნას არ იძლევა არც ბორნის და არც ამ თეორიის შემდგომი მოდიფიკაციები. ეს გარემოება მიგვითითებს იმაზე, რომ სითბოტევადობის დაყოფა ღებაისა და აინშტაინის ფუნქციების ჯამის სახით, ალბათ, მთლად დასაბუთებული არ არის.

თავი III

თავისუფალი ელექტრონის თეორია მბტალებში

§ 1. თავისუფალი ელექტრონების ჰიპოთეზა. სიმკვრივედროის კლასიკური თეორია

კლასიკური ელექტრონული თეორიის მიხედვით (ამ თეორიის ფუძემდებლად ითვლება დრუდე) მეტალები შედგებიან დადებითი იონებისაგან და თავისუფალი ელექტრონებისაგან. იონები მოთავსებულია მესერის კვანძურეტილებში და აწარმოებენ სითბურ რხევებს წონასწორობის წერტილის მახლობლობაში. ელექტრონები განიხილება როგორც თავისუფალი, ე. ი. მხედველობაში არ არის მიღებული ურთიერთქმედება როგორც ელექტრონებს, ისე ელექტრონებსა და მესერის იონებს შორის. ამ მხრივ ელექტრონების სისტემა მეტალის შიგნით შეიძლება განხილულ იქნას როგორც იდეალური გაზი (ელექტრონული გაზი), რომელიც სითბურ წონასწორობაში იმყოფება მესერის იონებთან. მეტალის საზღვარზე გამოსული ელექტრონები იწვევენ მეტალის შიგნით დადებითი მუხტების ინდუცირებას, რის შედეგადაც წარმოიშობა კონდენსატორის-მაგვარი ფენა, რომლის ელექტრონული ველი მიმართულია მეტალიდან გარეთ და ამგვარად ხელს უშლიან მეტალიდან ელექტრონების გამოსვლას (ნახ. 26).



ნახ. 26.

ამგვარად, მეტალის ზედაპირზე წარმოშობილი ორმაგი ფენა ქმნის პოტენციალურ ორმოს, რომლის შიგნით მომწყვდეულია ელექტრონული გაზი. გარდა ამისა, მეტალთა კლასიკურ თეორიაში გათვალისწინებული არ არის ელექტრონის ტალღური ბუნება, ამიტომ ელექტრონული გაზისათვის მიყენებულია კლასიკური შეხედულებები, ე. ი. მოძრაობა აიწერება ნიუტონის კანონით, ხოლო ენერგიის განაწილება—კლასიკური სტატისტიკის მიხედვით. კლასიკური სტატისტიკის მიხედვით გაზის ერთ ნაწი-

ლაქზე მოდის საშუალოდ $\frac{3}{2}kT$ ენერგია (თითო თავისუფლების ხარისხზე $\frac{1}{2} kT$ ენერგია). მაშასადამე, ასეთი ენერგია უნდა მიეწეროს მეტალის ყოველ თავისუფალ ელექტრონს. თუ დავუშვებთ, რომ მეტალის თითოეულ ატომზე მოდის საშუალოდ თითო ელექტრონი, მაშინ დრუდეს თეორიის მიხედვით ელექტრონული გაზის სრული ენერგიისათვის გვექნება:

$$E = \frac{3}{2} NkT, \quad (3.1)$$

სადაც N არის თავისუფალი ელექტრონების რიცხვი მეტალში, აქედან ელექტრონული გაზის სითბოტევადობისათვის ვღებულობთ:

$$C_v = \frac{dE}{dT} = \frac{3}{2} Nk, \quad (3.2)$$

გაზის გრამატომისათვის:

$$C_v = \frac{3}{2} R \simeq 3 \frac{\text{კალ.}}{\text{გრ. ატ.}}$$

დიულონგისა და პტის კანონის თანახმად, მესერის რხევებზე მოდის $3NkT$ ენერგია. ამიტომ მეტალური სხეულების სრული ენერგიისა და სითბოტევადობისათვის ვღებულობთ:

$$E = \frac{9}{2} NkT, \quad (3.3)$$

$$C_v = \frac{dE}{dT} = \frac{9}{2} Nk \simeq 9 \frac{\text{კალ.}}{\text{გრ. ატ.}} \quad (3.4)$$

მაშასადამე, მეტალური სხეულების სითბოტევადობა, დრუდეს თეორიის მიხედვით უნდა აღემატებოდეს არამეტალური სხეულების სითბოტევადობას დაახლოებით 3 კალ/გრ. ატ. სიდიდით. მაგრამ ცდები ადასტურებენ, რომ არამეტალური სხეულების სითბოტევადობა დაახლოებით ისეთია, როგორც მეტალური სხეულებისა. ამ წინააღმდეგობის თავიდან ასაცილებლად შეიძლება დავუშვა, რომ თავისუფალი ელექტრონების რიცხვი ბევრად ნაკლებია იმ რიცხვთან შედარებით, რომელიც ზემოთ იყო მიღებული (დაახლოებით ერთი ელექტრონი ერთ ატომზე), სამაგიეროდ ვერ ავხსნიდით მეტალური სხეულების მაღალ ელექტრო და სითბოტევადობის თვისებებს.

გარდა ზემოთ აღნიშნული წინააღმდეგობისა, მეტალთა კლასიკური ელექტრონული თეორია წააწყდა მრავალ გადაულახავ წინააღმდეგობას.

მაგალითად, კლასიკური ელექტრონული თეორიის მიხედვით მეტალების სითბოტევადობა ტემპერატურაზე არ უნდა იყოს დამოკიდებული, ცდა კი გვიჩვენებს, რომ ტემპერატურის შემცირებით სითბოტევადობა (როგორც ელექტრონული, ისე მესერის რხევების შესაბამისი) მცირდება და აბსოლუტურ ნულს ტემპერატურაზე ნულის ტოლი ხდება.

დრუდეს თეორიის მიხედვით გამოთვლილ იქნა მეტალების სითბო და ელექტროგამტარობის კოეფიციენტი და მათი შეფარდებისათვის მიღებულ იქნა ვილემან-ფრანცის კანონი

$$\frac{\kappa}{\sigma} = 3 \left(\frac{k}{e} \right)^2 \cdot T, \quad (3.5)$$

სადაც κ არის სითბოგამტარობის კოეფიციენტი, σ — ელექტროგამტარობის კოეფიციენტი, k — ბოლცმანის უნივერსალური მუდმივა, e — ელექტრონის მუხტი და T — სხეულის აბსოლუტური ტემპერატურა. ის გარემოება, რომ ვილემან-ფრანცის კანონი, რომელიც ძალიან კარგად მართლდება ცდებით, მიღებულ იქნა დრუდეს თეორიიდან, ითვლებოდა ამ თეორიის ბრწყინვალე გამარჯვებად. მაგრამ აღმოჩნდა, რომ დრუდეს თეორიით გამოთვლილი ცალკე κ და σ შეიცავს ისეთ პარამეტრებს, როგორიცაა ელექტრონის თავისუფალი განარბენი, რომლის სიდიდის შესახებ ამ თეორიას არაფრის თქმა არ შეეძლო, მაგრამ დრუდეს თეორიის საბედნიეროდ, κ/σ შეფარდებაში ეს განუსაზღვრელი პარამეტრი იკვეცება და ამრიგად მიიღება შედეგი, რომელიც ცდებს კარგად ემთხვევა, თუ მხედველობაში არ მივიღებთ რიცხვითი კოეფიციენტის იმ უმნიშვნელო განსხვავებას, რომელსაც უფრო ზუსტი გამოთვლები იძლევა.

გარდა ზემოთ მოყვანილი მაგალითებისა, დრუდეს თეორიის მიხედვით გამოთვლილ იქნა სხვა ფენექტებიც, მაგალითად: თერმოელექტრული ძალის სიდიდე, კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობა და სხვა, აღმოჩნდა, რომ დრუდეს თეორია აშკარა წინააღმდეგობაშია ცდასთან. მიუხედავად ამისა მდგომარეობა უცვლელი დარჩა კვანტური თეორიის ჩამოყალიბებამდე.

როგორც ცნობილია, ატომის აღნაგობა და ელემენტების პერიოდული სისტემა გაგებულ იქნა პაულის პრინციპის საფუძველზე. ამ პრინციპის თანახმად, ატომში თითოეულ კვანტურ მდგომარეობაში არ შეიძლება ორზე მეტი ელექტრონი (საწინააღმდეგო სპინებით) იმყოფებოდეს, ე. ი. კვანტურ მდგომარეობათა შევსების რიცხვები შეიძლება იყოს 0, 1, 2. 1926 წელს ფერმომ და დირაკმა პაულის ეს პრინციპი გადაიტანეს ატომიდან ნებისმიერ ნაწილაკთა სისტემაზე და ამრიგად შექმნეს ახალი სტატისტიკა — ფერმი-დირაკის სტატისტიკა, რომელიც პაულის პრინციპის გარდა, ეყრდნობა ერთნაირი ნაწილაკების იგივეურობის პრინციპს. პაულიმ პირველად გამოიყენა ეს ახალი სტატისტიკა ტუტე მეტალების პარამაგნეტიზმის ასახსნელად.

ზომერფელდმა ფერმი-დირაკის სტატისტიკა მიუყენა მეტალის თავისუფალ ელექტრონებს და ამრიგად საფუძველი ჩაუყარა მეტალთა კვანტურ თეორიას. ამრიგად, როგორც ღრუდეს, ისე ზომერფელდის თეორიაში მიღებულია თავისუფალი ელექტრონების ჰიპოთეზა. მაგრამ ამ ორ თეორიას შორის არსებობს პრინციპული განსხვავება:

1. ღრუდეს თეორიაში ელექტრონული გაზისათვის გამოყენებულია კლასიკური სტატისტიკა, ზომერფელდის თეორიაში კი — ფერმი-დირაკის სტატისტიკა.

2. ღრუდეს თეორიაში ელექტრონების მოძრაობა ემორჩილება კლასიკური მექანიკის (ნიუტონის მექანიკის) კანონებს, ზომერფელდის თეორიაში — ელექტრონების მოძრაობა აიწერება კვანტური მექანიკის კანონებით, ე. ი. შრედინგერის განტოლებით

3. საერთოა — დაშვება თავისუფალი ელექტრონული გაზისა.

თავისუფალი ელექტრონების ჰიპოთეზა, რომელიც საფუძველად უდევს ზომერფელდის თეორიას, წარმოადგენს ძალიან უხეშ მიახლოებას, მაგრამ იგი მაინც იძლევა საშუალებას გამოვთვალოთ მთელი რიგი ფიზიკური მახასიათებლები ტუტე მეტალებისა, რომელთათვის ეს მოდელი ყველაზე უფრო მართებულია. მაგალითად, ეს მოდელი საშუალებას იძლევა გამოვთვალოთ ელექტრონული გაზის სითბოტევადობა, მაგნიტური ამთვისებლობა, ჰოლის მუდმივა და ზოგიერთი ოპტიკური კონსტანტები. ამ მოდელით შეუძლებელია ელექტრო და სითბოგამტარობის კოეფიციენტების აბსოლუტური სიდიდის გამოთვლა, რადგანაც ამ მოდელზე დაყრდნობით პრინციპულად შეუძლებელია ელექტრონების თავისუფალი განარბენის გამოთვლა. თავისუფალი ელექტრონების თეორიის ზოგიერთი ლეფექტი დაძლეულ იქნა მეტალთა ზონურ თეორიაში, რომელიც განხილული იქნება შემდეგ თავში. ამ თავში კი განვიხილავთ მეტალთა ზომერფელდის თეორიას.

§ 2. თავისუფალი ელემენტარული კვანტური თეორია

ზომერფელდის თეორიის თანახმად, მეტალში სავალენტო ელექტრონები თავისუფალია ($V=0$); ამიტომ სათანადო შრედინგერის განტოლებას აქვს შემდეგი სახე:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi=E\psi, \quad (3.6)$$

სადაც E არის ელექტრონის კინეტიკური ენერგია, ψ — ტალღური ფუნქცია და m — მასა (4.6) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს ბრტყელი ტალღა

$$\psi = A \cdot e^{ikr} \quad (3.7)$$

სადაც $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ არის ელექტრონის ტალღური ვექტორი. კოეფიციენტი

A განისაზღვრება ψ ფუნქციის ნორმირების პირობიდან

$$\int_0 \psi^* \psi dv = 1. \quad (3.8)$$

აქედან ვღებულობთ

$$A = \Omega^{-1/2},$$

სადაც Ω არის კრისტალის მოცულობა, ამრიგად,

$$\psi = \Omega^{-1/2} \cdot e^{ikr}. \quad (3.7a)$$

თუ ψ ფუნქციის ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (3.6) განტოლებაში, ელექტრონის ენერგიისათვის მივიღებთ

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.9)$$

მეორე მხრივ, თავისუფალი ელექტრონის ენერგია იმპულსთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (3.9a)$$

ამიტომ (3.9) და (3.9a) ფორმულების შედარება გვაძლევს

$$p = \hbar k. \quad (3.10)$$

უსასრულო ზომის კრისტალის შემთხვევაში (3.7a) ამოხსნას არავითარი დამატებითი პირობა არ ედება, ამიტომ ელექტრონის ტალღური ვექტორი k ანდა იმპულსი p ღებულობს უწყვეტ მნიშვნელობებს, როგორც ამას ადგილი აქვს კლასიკურ თეორიაში თავისუფალი ელექტრონისათვის. სასრულო ზომის კრისტალის შემთხვევაში შრედინგერის განტოლების ამოხსნისას გათვალისწინებული უნდა იქნეს სასაზღვრო პირობები. ასეთ სასაზღვრო პირობას შეადგენს $\psi = 0$ სხეულის ზედაპირზე. ამ სასაზღვრო პირობას ის ფიზიკური არსი აქვს, რომ ელექტრონს არ შეუძლია მეტალის მოცულობიდან გამოსვლა. იგი მომწყვდეულია მეტალის მოცულობის შიგნით. შრედინგერის განტოლების (3.6) ამოხსნა (3.7a) სახით აღნიშნულ სასაზღვრო პირობას არ აკმაყოფილებს. მაგრამ, ვინაიდან (3.6) განტოლება წრფივია, მის ზოგად ამოხსნას წარმოადგენს (3.7a) სახის ტალღების სუპერპოზიციას. მაგალითად, თუ ავიღებთ ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულებით გავრცელებული ტალღების სუპერპოზიციას, მაშინ გამრბენი ტალღის ნაცვლად მივიღებთ მდგარ ტალღას, რომელსაც ექნება კვანძ-წერტილები $\psi = 0$ სხეულის ზედაპირზე. $\psi = 0$ სასაზღვრო პირობის და-

კმაყოფილება k -ს ადებს გარკვეულ პირობებს, ისე როგორც ეს განხილული იყო წინა თავში. სრულიად იგივე შედეგი მიიღება იმ შემთხვევაში, თუ $\psi=0$ სასაზღვრო პირობის ნაცვლად გამოვიყენებთ ბორნ-კარმანის პერიოდულობის პირობას. ეს უკანასკნელი მათემატიკური თვალსაზრისით უფრო ხელსაყრელია, ვინაიდან იგი საშუალებას გვაძლევს მდგარი ტალღების ნაცვლად ვისარგებლოთ გამრბენი ტალღებით (3.7ა). თუ კრისტალს კუბის ფორმა აქვს, რომლის წახნაგის სიგრძეა L , მაშინ ბორნ-კარმანის პერიოდულობის პირობა ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)$$

თუ ψ -თვის ავიღებთ (3.7ა), გვექნება:

$$e^{i(k_x(x+L)+k_y y+k_z z)} = e^{i(k_x x+k_y(y+L)+k_z z)} = e^{i(k_x x+k_y y+k_z(z+L))} = e^{i(k_x x+k_y y+k_z z)},$$

აქედან

$$k_x L = 2\pi n_x, \quad k_y L = 2\pi n_y, \quad k_z L = 2\pi n_z \quad (3.12a)$$

ანდა

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z.$$

ელექტრონის იმპულსისათვის

$$P_x = \hbar k_x = \frac{\hbar}{L} n_x, \quad P_y = \frac{\hbar}{L} n_y, \quad P_z = \frac{\hbar}{L} n_z. \quad (3.12 b)$$

n_x, n_y, n_z —მთელი რიცხვებია.

ამრიგად ბორნ-კარმანის პერიოდულობის პირობის გამოყენება გვაძლევს ელექტრონის ტალღური ვექტორის, ანდა იმპულსის დისკრეტულ მნიშვნელობებს. შესაბამისად ამისა, ელექტრონის ენერგიის შესაძლო მნიშვნელობებისათვის მიიღება დისკრეტული მნიშვნელობები.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2}{V^{2/3}}.$$

ხადაც

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

და $V = L^3$ —სხეულის მოცულობა.

ამრიგად, (3.7 ა) ფუნქცია აგვიწერს ელექტრონის მდგომარეობას იმპულსით p და ენერგიით E . ტალღურ ენაზე რომ ვთქვათ, თავისუფალი ელექტრონი აიწერება ზრტყელი ტალღით, ხადაც $\hbar/p$ არის ტალღის სიგრძე, ხოლო $E/\hbar$ —სიხშირე.

კვანტური რიცხვების n_x , n_y და n_z -ის ერთ გარკვეულ მნიშვნელობას ეთანადება ელექტრონის ერთი კვანტური მდგომარეობა. ვინაიდან აღნიშნული რიცხვების მომდევნო მნიშვნელობები ერთმანეთისაგან განსხვავდებიან ერთით. ამიტომ, თანახმად (3.12 ბ)-სა, გვექნება:

$$(\Delta p_x)_{min} = \frac{h}{L}, \quad (\Delta p_y)_{min} = \frac{h}{L} \quad \text{და} \quad (\Delta p_z)_{min} = \frac{h}{L}.$$

გეომეტრიულად ეს იმას ნიშნავს, რომ ელექტრონის ერთ კვანტურ მდგომარეობას ეთანადება იმპულსთა სივრცის მოცულობა $\left(\frac{h}{L}\right)^3 = h^3/V$,

ანდა ფაზური სივრცის მოცულობა h^3 .

ამრიგად იმპულსთა სივრცის მოცულობას

$$d p_x d p_y d p_z = \hbar^3 d k_x d k_y d k_z$$

ეთანადება

$$\frac{\hbar^3 d k_x d k_y d k_z}{h^3/V} = \frac{V}{(2\pi)^3} d k_x d k_y d k_z$$

კვანტური მდგომარეობები.

თუ გავითვალისწინებთ ელექტრონის სპინის ორ შესაძლო მნიშვნელობას, მაშინ ტალღური ვექტორის აღებულ ინტერვალში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვისათვის მიიღება

$$G(k_x k_y k_z) d k_x d k_y d k_z = 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} d k_x d k_y d k_z \quad (3.13)$$

ანდა სფერულ კოორდინატებში (თუ კუთხეებით მოვახდენთ ინტეგრებას)

$$G(k) d k = \frac{V}{\pi^3} k^2 d k. \quad (3.14)$$

თუ k -დან გადავალთ ენერგიაზე, გვექნება

$$G(\epsilon) d \epsilon = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon} d \epsilon. \quad (3.15)$$

ეს უკანასკნელი გვაძლევს კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვს, მოთავსებულს ენერგიის $(\epsilon, \epsilon + d\epsilon)$ ინტერვალში. $G(\epsilon)$ ფუნქციას უწოდებენ მდგომარეობათა სიმკვრივეს და გვაძლევს კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვს ენერგიის ერთეულოვან ინტერვალში ($d\epsilon = 1$).

§ 3. ელემენტარული გაზის სტატისტიკა

§ 1-ში ჩვენ აღვნიშნეთ ის ძირითადი წინააღმდეგობანი, რომელსაც წააწყდა მეტალთა ელექტრონული თეორია კლასიკური სტატისტიკის გა-

მოყენების საფუძველზე. ეს წინააღმდეგობები არსებითად დაძლეულ იქნა ზომერჯედიის მიერ, ელექტრონული განისათვის კვანტური სტატისტიკის — ფერმი-დირაკის სტატისტიკის გამოყენებით. ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქციას (ალბათობა იმისა, რომ კვანტური მდგომარეობა ენერგიით E დაკავებულია ელექტრონით) აქვს შემდეგი სახე:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1} \quad (3.16)$$

სადაც μ არის ქიმიური პოტენციალი (ხშირად ფერმის ენერგიას უწოდებენ), იგი განისაზღვრება შემდეგი პირობიდან

$$\int d\eta = \int f(E) G(E) dE = N, \quad (3.17)$$

სადაც N — ელექტრონების საერთო რიცხვია, ხოლო $G(E)$ მოიცემა (3.15) ფორმულით. ელექტრონის საშუალო ენერგიისათვის გვექნება:

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \int E d\eta = \frac{1}{N} \int E f(E) G(E) dE. \quad (3.18)$$

როგორც ცნობილია, ფერმი-დირაკის სტატისტიკა ემყარება ნაწილაკების იგივეურობისა და პაულის აკრძალვის პრინციპს. პაულის აკრძალვის პრინციპის საფუძველზე ერთ კვანტურ მდგომარეობაში არ შეიძლება იმყოფებოდეს ერთზე მეტი ელექტრონი გარკვეული მიმართულების, ანდა ორი ელექტრონი ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულების სპინებით. აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე $T=0$ (ყველა ელექტრონი დაიკავებდა ენერგიის მინიმალურ დონეს პაულის აკრძალვის პრინციპი რომ არ ყოფილიყო. პაულის აკრძალვის პრინციპის არსებობის გამო $T=0$ ტემპერატურაზე უმდაბლესი ენერგეტიკული დონე დაკავებული იქნება მხოლოდ ორი ელექტრონით, საწინააღმდეგო სპინებით, შემდეგი დონე — ისევე ორი ელექტრონით, და ა. შ. შევსებული გვექნება ორ-ორი ელექტრონით (საწინააღმდეგო მიმართულების სპინებით). ყველა ქვედა ენერგეტიკული დონე $N/2$ -მდე, ხოლო დანარჩენი ზედა $N/2$ ენერგეტიკული დონეები იქნებიან ცარიელი (ნახ. 27).

$T=0$ ტემპერატურაზე ელექტრონის მაქსიმალურ ენერგიას (რომელიც ეთანადება $N/2$ დონეს) ϵ_{max} -ს უწოდებენ ფერმის საზღვარს (ნახ. 27). ენერგეტიკული დონეები პირობით აღნიშნულია პოარიზონტალური ხაზებით. ამასთან ენერგია იზრდება ქვევიდან ზევით $\epsilon_{min}=0$ -დან ϵ_{max} -მდე.

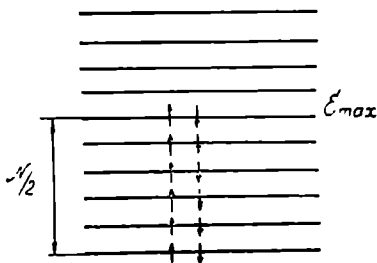
ვინაიდან $E_{max} = \frac{p_{max}^2}{2m}$, ამიტომ იმპულსთა სივრცეში შეიძლება ავიღოთ

სფერო p_{max} რადიუსით, მაშინ $T=0$ ტემპერატურაზე ყველა კვანტური მდგომარეობა მოთავსებული ამ სფეროს შიგნით, დაკავებული იქნებიან

ელექტრონებით, ხოლო სფეროს გარეთ მდებარე კვანტური მდგომარეობები იქნებიან ცარიელი. ასეთ სფეროს ხშირად ფერმის სფეროს უწოდებენ. ამრიგად, $T=0$ ტემპერატურაზე განაწილების ფუნქციისათვის გვექნება

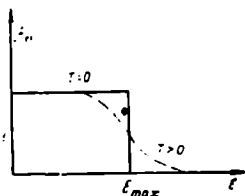
$$\begin{aligned} f &= 1 \quad \text{როცა } E < E_{\max}, \\ f &= 0 \quad \text{" } E > E_{\max}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

ეს განაწილება ნახ. 28-ზე ნაჩვენებია ოთხკუთხედის სახით. იმისათვის, რომ ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია (3.16) აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე გადადიოდეს (6.19)-ში, საჭიროა, რომ ქიმიური პოტენციალი $\mu = E_{\max}$. მაშასადამე, ელექტრონული გაზისათვის ქიმიური პოტენციალი $T=0$ ტემპერატურაზე უდრის ელექტრონების მაქსიმალურ ენერგიას. ქვემოთ გამოვიყვანთ ქიმიური პოტენციალის დამოკიდებულებას ტემპერატურისაგან ელექტრონული გაზისათვის და ვუჩვენებთ, რომ იგი უმნიშვნელოდ იცვლება ტემპერატურის საკმაოდ დიდ ფარგლებში, ამიტომ მთელ რიგ შემთხვევებში შეიძლება მივიღოთ, რომ $\mu = \mu^0 = E_{\max}$.



ნახ. 27.

$T > 0$ ტემპერატურაზე ელექტრონული გაზის ზემოთ აღწერილი განაწილება იცვლება. ფერმის საზღვრის მახლობლად მდებარე ელექტრონები



ნახ. 28.

გადადიან ზედა ენერგეტიკულ დონეებზე და ნებისმიერი E ენერგიის კვანტური მდგომარეობის ელექტრონით დაკავების ალბათობა მოცემული გვექნება (3.16) ფორმულით. ეს განაწილება ნახ. 28-ზე ნაჩვენებია წყვეტილი მრუდით. ამ ნახაზზე ნაჩვენებია ზედა დაშტრიხული ფართი გამოსახავს ელექტრონების რიცხვს, რომლებიც ფერმის საზღვრის მახლობელ ქვე-

და ენერგეტიკული დონეებიდან გადავიდნენ უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეებზე (ქვედა დაშტრიხული ფართი). ჩვენ ქვემოთ დავამტკიცებთ, რომ დაშტრიხული ფართის შესაბამის ელექტრონებს შეაქვთ წვლილი სითბურ ენერგიაში, რომელიც აბსოლუტური ტემპერატურის ფუნქციაა.

ასეთი გადასახლებული (ზედა ენერგეტიკულ დონეებზე) ელექტრონების რიცხვი ძალიან მცირეა თავისუფალი ელექტრონების საერთო რიცხვთან შედარებით, ამიტომ მათ მცირე წვლილი შეაქვთ სხეულის სითბოტევადობაში. ეს გარემოება ხსნის კლასიკურ თეორიაში აღნიშნულ წინააღმდეგობას მეტალური სხეულების სითბოტევადობის საკითხში.

სანამ გადავიდოდეთ ელექტრონული გაზის ენერგიის ანდა სითბოტევადობის გამოთვლაზე, განვიხილოთ ფერმი-დირაკის ფუნქციის ერთი მეტად მნიშვნელოვანი თვისება. იგი საშუალებას გვაძლევს მივიღოთ მეტად სასარგებლო მიახლოებითი ფორმულა, რომელსაც შემდეგში ხშირად გამოვიყენებთ.

განვიხილოთ ინტეგრალი

$$I = C \int_0^{\infty} \alpha(E) \frac{df}{dE} dE, \quad (3.20)$$

სადაც $\alpha(E)$ —უწყვეტი ფუნქციაა E -ს, f —ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქციაა (3.16). გადავიდეთ ε ცვლადიდან ახალ ცვლადზე

$$\eta = \frac{E - \mu}{kT},$$

მაშინ, ნაცვლად (3.20)-ისა, გვექნება

$$I = C \int_{-\mu/kT}^{\infty} \beta(\eta) \frac{d}{d\eta} f(\eta) d\eta, \quad (3.20 \text{ ა})$$

$$(\alpha(\varepsilon) = \beta(\eta))$$

შემდეგ პარაგრაფში ჩვენ ვუჩვენებთ, რომ μ რამდენიმე ელექტრონ-ვოლტის ტოლია. ამიტომ დაბალი ტემპერატურის დროს $\mu/kT \gg 1$, რის გამოც (3.20 ა)-ს ინტეგრირების ქვედა საზღვარი შეიძლება შეიცვალოს — $-\infty$ -ით. ამრიგად

$$I = C \int_{-\infty}^{\infty} \beta(\eta) \frac{d}{d\eta} f(\eta) d\eta. \quad (3.20 \text{ ბ})$$

$\beta(\eta)$ დ ვშალოთ ტეილორის მწკრივად η -ს ხარისხებად:

$$\beta(\eta) = \beta(0) + \left(\frac{\partial \beta}{\partial \eta} \right)_0 \cdot \eta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial \eta^2} \right)_0 \cdot \eta^2 + \dots$$

თუ $\beta(\eta)$ -ს ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (3.20 ბ)-ში, მივიღებთ:

$$I = C \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{d\eta} \left[\beta(0) + \left(\frac{\partial \beta}{\partial \eta} \right)_0 \cdot \eta + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial \eta^2} \right)_0 \cdot \eta^2 + \dots \right] d\eta.$$

რადგანაც $\frac{df}{d\eta}$ ლუწი ფუნქციაა η -ს, ამიტომ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \beta}{\partial \eta} \right)_0 \cdot \eta d\eta = \left(\frac{\partial \beta}{\partial \eta} \right)_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{d\eta} \cdot \eta d\eta = 0.$$

პირველი ინტეგრალი ადვილად გამოითვლება

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial \eta} \beta(0) d\eta = \beta(0) \left| f(\eta) \right|_{-\infty}^{\infty} = -\beta(0) = -\alpha(\mu).$$

ხოლო, რაც შეეხება მესამე ინტეგრალს, იგი შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial \eta^2} \right)_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 \frac{d\eta}{d\eta} d\eta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial \eta^2} \right)_0 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta^2 e^{-\eta}}{(e^{-\eta} + 1)^2} d\eta.$$

ეს უკანასკნელი მარტივად გამოითვლება, თუ ინტეგრალქვეშა ფუნქციას დავშლით მწკრივად $e^{-\eta}$ -ს ხარისხებად და შემდეგ მოვახდენთ მწკრივის ცალკეული წევრების ინტეგრებას

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta^2 e^{-\eta}}{(e^{-\eta} + 1)^2} d\eta &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 (e^{-\eta} - 2e^{-2\eta} + 3e^{-3\eta} + \dots) d\eta = \\ &= 4 \left(1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} + \dots \right) = \frac{\pi^2}{3}. \end{aligned}$$

საბოლოოდ გვექნება:

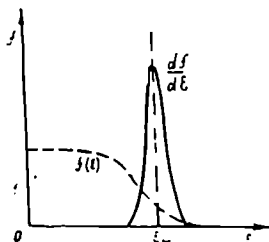
$$I = -C \left(\beta(0) + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial \eta^2} \right)_0 + \dots \right). \quad (3.21)$$

თუ η ცვლადიდან გადავალოთ ისევ ε ცვლადზე, მივიღებთ:

$$I = -C \left(\alpha(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \varepsilon^2} \right)_{\varepsilon=\mu} \right). \quad (3.22)$$

გავარჩიოთ მიღებული მიახლოებითი ფორმულის (3.22) ფიზიკური შინაარსი. ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია $f(\varepsilon)$ ძალიან სწრაფად ეცემა $\varepsilon = \mu$ წერტილის მახლობლობაში, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 29-ზე. f ფუნქციის დაცემა $\varepsilon = \mu$ წერტილის მახლობლობაში მით უფრო

მკვეთრია, რაც უფრო დაბალია ტემპერატურა, ამიტომ ფუნქციის ცვლილება $\frac{df}{dE}$, $E=\mu$ წერტილის მახლობლობაში ძალიან მკვეთრია, თითქმის ღირაკის ბ ფუნქციის მსგავსია. იგი ფაქტიურად ნულისაგან განსხვავებულია $\sim kT$ სიგანის არეში. ამიტომ თუ



ნახ. 29.

ნულოვან მიახლოებაში $\frac{df}{dε}$ სიდიდეს მივიღებთ ბ ფუნქციად, მაშინ საინტეგრაციო არეში $α(ε)$ შეიძლება შეიცვალოს $α(μ)$ -ით და გავიტანოთ ინტეგრალის გარეთ:

$$\int_{-\infty}^{\infty} α(ε) \frac{df}{dE} dE = α(μ) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dE} dE = α(μ).$$

ამრიგად, მივიღეთ (3.22) მიახლოებითი ფორმულის პირველი წევრი. შემდეგ მიახლოებაში გათვალისწინებული უნდა იქნეს $\frac{df}{dE}$ მრუდის სიგანე; სწორედ ამ შესწორებას ეთანადება (3.22) ფორმულის მეორე წევრი.

§ 4. ელემენტარული გაზის ენერგია და მდგომარეობის განტოლება

გავარჩიოთ ცალ-ცალკე $T=0$ და $T>0$ შემთხვევები:

ა) ელექტრონული გაზი $T=0$ ტემპერატურაზე.

აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე გვაქვს:

$$f=1, \text{ როცა } E=E_{max}$$

$$f=0, \text{ „ } E<E_{max}$$

თუ განაწილების ფუნქციის ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (3.17) და (3.18) ფორმულებში და $G(ε)$ -თვის ავიღებთ (3.15) მნიშვნელობას, მივიღებთ:

$$N = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_{max}} \sqrt{E} dE = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E_{max}^{3/2}. \quad (3.23)$$

აქედან

$$E_{max} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (3.23 \text{ ა})$$

როგორც ვხედავთ, აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე ელექტრონის მაქსიმალური ენერგია დამოკიდებულია მხოლოდ ელექტრონული გაზის სიმკვრივეზე ($n = N/V$). ელექტრონის საშუალო ენერგიისათვის ვღებულობთ:

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \frac{1}{N} \int \epsilon dn = \frac{V}{N 2\pi^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{E_{max}} E^{3/2} dE = \\ &= \frac{V}{N} \cdot \frac{1}{5\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_{max}^{5/2} = \frac{3}{5} E_{max}.\end{aligned}\quad (3.24)$$

გაზის სრული ენერგიისათვის გვექნება

$$U = n \bar{E} = n \cdot \frac{3}{5} E_{max} = \frac{3n\hbar^3}{10m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}.\quad (3.25)$$

კლასიკური თეორიის მიხედვით ელექტრონული გაზის ენერგია $T=0$ ტემპერატურაზე ნულის ტოლია ($U = \frac{3}{2} N k T$). კვანტური თეორიის მიხედვით ელექტრონულ გაზს $T=0$ ტემპერატურაზე, თანახმად (3.24) ფორმულისა, უზარმაზარი ენერგია აქვს, რომელსაც არავითარი საერთო არ გააჩნია სითბურ ენერგიასთან და დაკავშირებულია წმინდა კვანტურ ეფექტთან. სანამ (3.25) ენერგიის რიცხობრივ შეფასებაზე გადავიდოდეთ, გამოვთვალოთ ელექტრონული გაზის წნევა $T=0$ ტემპერატურაზე (ნულოვანი წნევა).

ელექტრონული გაზის წნევა განისაზღვრება ისე, როგორც გაზთა კინეტიკურ თეორიაში. წნევა არის იმპულსების ჯამის საშუალო მნიშვნელობა, რომელსაც ელექტრონები გადასცემენ მეტალის ზედაპირს 1 სმ²-ს პერპენდიკულარული მიმართულებით ერთი წამის განმავლობაში. ვინაიდან მეტალის ჯიგით თავისუფალი ელექტრონების მოძრაობა ქაოსურია, საკმარისია განვიხილოთ მათი მოძრაობა 0x ღერძის მიმართულებით. თუ ელექტრონის სიჩქარის კომპონენტს 0x ღერძის მიმართულებით აღვნიშნავთ v_x -ით, მაშინ მეტალის ზედაპირიდან ერთხელ არეკვლის დროს იგი გადასცემს ამ უკანასკნელს $2mv_x$ იმპულსს. თუ სიმარტივისათვის განვიხილავთ მეტალის 1 სმ³ მოცულობას, მაშინ ერთი ელექტრონის მიერ 1 წამში გადაცემული იმპულსი ზედაპირის 1 სმ²-ზე იქნება $2mv_x$; ამრიგად, ელექტრონული გაზის წნევისათვის გვექნება

$$P_0 = \frac{4m}{\hbar^3} \int v_x^2 d p_x d p_y d p_z = 4m \cdot \frac{m^3}{h^3} \int v_x^2 d v_x d v_y d v_z.$$

აქ ინტეგრირება ხდება $v_x < 0$ ნახევარსფეროში. თუ შემოვიტანთ μ, φ, ψ სფერულ კოორდინატებს, მაშინ

$$P_0 = 4m \left(\frac{m}{h} \right)^3 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{\pi/2}^{\pi} \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{v_{max}} v^4 dv =$$

$$= \frac{4\pi}{3} \cdot 2m \left(\frac{m}{h} \right)^3 \frac{v_{max}^5}{5},$$

თუ გავითვალისწინებთ $E_{max} = \frac{mv_{max}^2}{2}$ დამოკიდებულებას, მივიღებთ

$$P_0 = \frac{2}{5} n E_{max} = \frac{2}{3} U_0. \quad (3.26)$$

ამრიგად, ელექტრონული გაზის წნევასა და ენერგიას შორის გვაქვს ისეთი დამოკიდებულება, როგორც გაზთა კინეტიკურ თეორიაში. თუ (3.20)-ში შევცნათ $n = N/V$, მაშინ ელექტრონული გაზის მდგომარეობის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე

$$P_0 V = \frac{2}{3} N \bar{E}. \quad (3.27)$$

გაზთა კინეტიკურ თეორიაში E პირდაპირპროპორციულია აბსოლუტური ტემპერატურისა, აქ კი $\bar{E}$ ტემპერატურაზე სრულებით არ არის დამოკიდებული. ამრიგად, ელექტრონული გაზის მდგომარეობის განტოლება გარეგნულად ემთხვევა ჩვეულებრივი გაზის მდგომარეობის განტოლებას, მაგრამ მისგან არსებითად განსხვავდება, რადგანაც (3.27) განტოლების მარჯვენა მხარე T -ზე არ არის დამოკიდებული. ელექტრონული გაზის მდგომარეობის განტოლების გადახვევას იდეალური გაზის მდგომარეობის განტოლებიდან ხშირად გადაგვარებას უწოდებენ.

ზემოთ მიღებული სიდიდეების საილუსტრაციოდ განვიხილოთ კონკრეტული მაგალითი: Ag -ს შემთხვევაში (სიმკვრივე $= 10,5$, ატომური წონა $— 107,9$). თუ თითოეულ ატომზე ავიღებთ თითო ელექტრონს, ელექტრონული გაზისათვის გვექნება:

$$n = \frac{10,5 \cdot 6,06 \cdot 10^{23}}{107,9} = 5 \cdot 10^{22}.$$

ამ მნიშვნელობის ჩასმა (3.17) და (3.20) ფორმულებში გვაძლევს:

$$E_{max} = 8,5 \cdot 10^{-12} \text{ ევ} \sim 5,4 \text{ ევ} \text{ და } P_0 = 2 \cdot 10^{11} \text{ ევ}^2/\text{სმ}^2 \sim 2 \cdot 10^6 \text{ ატმ.}$$

როგორც ვხედავთ, ელექტრონული გაზის ნულოვანი წნევა და ასევე ნულოვანი ენერგია ძალზე დიდია. ნულოვანი წნევის ასეთი უზარმაზარი სიდიდის გამო ელექტრონული გაზი თითქმის ყველა პრაქტიკულად მისაღწევ ტემპერატურაზე გადაგვარებულია, ამიტომ მისთვის სამართლიანია მხოლოდ კვანტური სტატისტიკა.

ბ) ელექტრონული გაზი $T > 0$ ტემპერატურაზე

1. ქიმიური პოტენციალის დამოკიდებულება ტემპერატურისაგან. გაზის ქიმიური პოტენციალი მოინახება შემდეგი პირობიდან

$$\int f(E) G(E) dE = N, \quad (3.28)$$

ანდა

$$C \int f(E) \sqrt{E} dE = N,$$

სადაც

$$C = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2}.$$

(3.28) ფორმულის მარცხენა მხარის ერთხელ ნაწილობრივი ინტეგრირება გვაძლევს:

$$N = C \left[f(E) \frac{E^{3/2}}{3/2} \right]_0^\infty - \frac{2}{3} \int_0^\infty E^{3/2} \frac{df}{dE} dE = -\frac{2}{3} C \int_0^\infty E^{3/2} \frac{df}{dE} dE.$$

ეს ინტეგრალი (3.20) ინტეგრალის ტიპისაა, სადაც

$$\alpha = -\frac{2}{3} E^{3/2},$$

ამიტომ მისი ამოხსნა, თანახმად (3.22) ფორმულისა, იქნება

$$N = C \left(\frac{2}{3} \mu^{3/2} \pm \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \cdot \frac{1}{2\sqrt{\mu}} \right) = \frac{2}{3} C \mu^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right).$$

მეორე მხრივ, თანახმად (3.27)-სა

$$N = \frac{2}{3} C \mu_0^{3/2} \quad (\mu_0 = E_{max}),$$

ამრიგად

$$\mu_0^{3/2} = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right].$$

აქედან

$$\mu \approx \mu_0 \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right]^{-2/3} \approx \mu_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right). \quad (3.29)$$

(3.29) ფორმულა გვაძლევს ქიმიური პოტენციალის დამოკიდებულებას ტემპერატურისაგან. ამავე პარაგრაფში ჩვენ ვუჩვენეთ, რომ $\mu_0 = \epsilon_{max} \sim 5eV$, ოთახის ტემპერატურაზე $kT/\mu_0 \sim \frac{1}{40} eV$, ამიტომ $kT/\mu_0 \ll 1$.

მაშასადამე, თანახმად (3.28)—ფორმულისა, ქიმიური პოტენციალი უმნიშვნელოდ იცვლება ტემპერატურის საკმარისად დიდ ფარგლებში, ამიტომ მთელ რიგ შემთხვევებში შეიძლება მივიღოთ $\mu \approx \mu_0$.

2. ელექტრონული გაზის ენერგია, სითბოტევადობა და მდგომარეობის განტოლება. ელექტრონის საშუალო ენერგია

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \int E f(E) G(E) dE$$

ანდა

$$\bar{E} = \frac{C}{N} \int E^{5/2} f(E) dE.$$

ერთხელ ნაწილობრივ ინტეგრირება გვაძლევს:

$$\bar{E} = \frac{C}{N} \left\{ f(E) \frac{E^{5/2}}{5/2} \Big|_0^\infty - \frac{2}{5} \int_0^\infty E^{5/2} \frac{df}{dE} dE \right\} = -\frac{2}{5} \frac{C}{N} \int_0^\infty E^{5/2} \frac{df}{dE} dE.$$

ეს ინტეგრალი (3.20) ინტეგრალის ტიპისაა, სადაც

$$\alpha = -\frac{2}{5N} \cdot E^{5/2},$$

ამიტომ მისი ამოხსნა თანახმად (3.22) ფორმულისა, იქნება

$$\bar{E} = \frac{C}{N} \left(\frac{2}{5} \mu^{5/2} + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \mu^{1/2} \right).$$

მეორე მხრივ

$$\frac{C}{N} = \mu_0^{-3/2},$$

ამიტომ საბოლოოდ ელექტრონული გაზის სრული ენერგიისათვის მივიღებთ

$$U = n \bar{E} = U_0 + \frac{1}{2} \gamma T^2, \quad (3.30)$$

სადაც

$$\gamma = \frac{\pi^2 k^2}{2} \cdot \frac{n}{\mu_0}.$$

ელექტრონული გაზის სითბოტევადობა

$$C_v = \frac{dU}{dT} = \gamma T \quad (3.30 \text{ ა})$$

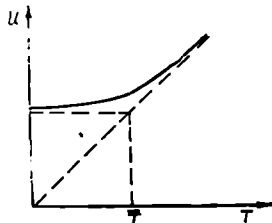
მაშასადამე, ელექტრონული გაზის სითბოტევადობა აბსოლუტური ტემპერატურის პირდაპირპროპორციულია, ამიტომ, როდესაც $T \rightarrow 0$ გვექნება $C_v \rightarrow 0$. მეტალური სხეულების სითბოტევადობა ორი ნაწილისაგან შედგება: ერთი შეესაბამება ელექტრონულ გაზს და პირდაპირპროპორციულია აბსოლუტური ტემპერატურის პირველი ხარისხისა, მეორე კი — მესერის ატომების რხევებს, რომელიც დაბალ ტემპერატურაზე აბსოლუტური ტემპერატურის კუბის პროპორციულია:

$$C_v = \gamma T + b T^3.$$

თუ ტემპერატურა ძალიან მცირე არ არის, ელექტრონული სითბოტევადობა შეიძლება უგულებელყოფილ იქნეს მესერის სითბოტევადობასთან შედარებით. ძალიან დაბალ ტემპერატურაზე კი — პირიქით, ელექტრონული სითბოტევადობა ხდება არსებითი, მესერის სითბოტევადობა შეიძლება უგულებელყოფილი იქნეს. ნახ. 30-ზე ნაჩვენებია ელექტრონული გაზის ენერგიის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე. აქ უწყვეტი ხაზით მოცემულია კვანტური, ხოლო პუნქტირით — კლასიკური შედეგი. აქვე ნაჩვენებია გადაგვარების არეც $T \ll \bar{T}$.

როგორც ვხედავთ, $T \gg \bar{T}$ ტემპერატურაზე კვანტური და კლასიკური შედეგები თითქმის ერთმანეთს ემთხვევიან. უნდა აღინიშნოს შემდეგი: გადაგვარების ტემპერატურა $\bar{T}$ (რომლის ქვემოთ საჭიროა ვიხმაროთ კვანტური ფორმულები, ზევით კი — კლასიკური) მეტალებისათვის რამდენადაც ათას გრადუსს აღემატება. ამიტომ ასეთ ტემპერატურაზე მეტალი მხოლოდ გაზოვან მდგომარეობაში შეიძლება იმყოფებოდეს, როდესაც კვანტურ ეფექტებს შეიძლება ყურადღება არ მივაქციოთ.

ელექტრონული გაზის ენტროპია



ნახ. 30.

$$S = \int \frac{C_v}{T} dT = \frac{\pi^2 k^2 n}{2\mu_0} \cdot T, \quad (3.32)$$

ეს უკანასკნელი მიისწრაფვის ნულისაკენ, როდესაც $T \rightarrow 0$, რაც სრულ თანხმობაში იმყოფება ნერსტის თეორემასთან.

დასასრულს განვიხილოთ ელექტრონული გაზის მდგომარეობის განტოლება. ამავე პარაგრაფში ჩვენ გამოთვალეთ ელექტრონული გაზის წნევა $T=0$ ტემპერატურაზე. ეს გამოთვლა ძალაში რჩება აგრეთვე $T>0$ ტემპერატურაზე, ამიტომ მდგომარეობის განტოლებისათვის გვექნება:

$$PV = \frac{2}{3} \bar{U}. \quad (3.33)$$

თუ ამ უკანასკნელში $\bar{U}$ მნიშვნელობას შევიტანთ (3.30)-დან, მივიღებთ

$$PV = \frac{2}{3} \left(U_0 + \frac{1}{2} \gamma T^2 \right), \quad (3.34)$$

ანდა

$$PV = \frac{3}{5} \mu_0 n \left(1 + \frac{5}{12} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right).$$

მოვნახოთ $C_p - C_v$ დამოკიდებულება ტემპერატურისაგან გადაგვარებული ელექტრონული გაზისათვის დაბალ ტემპერატურაზე: ცნობილია, რომ

$$C_p - C_v = -T \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p^2}{\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T}. \quad (3.35)$$

3.34) ფორმულის მიხედვით

$$\left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T \sim \frac{1}{p^2} \quad \text{და} \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \sim \frac{T}{p}.$$

ამიტომ ამ მნიშვნელობების ჩასმა (3.35)-ში, გვაძლევს

$$C_p - C_v \sim T^3.$$

კრისტალური სხეულების ზონური თეორია

შ ე ს ა ვ ა ლ ი

მყარი სხეულების ფიზიკის ზოგად ამოცანას წარმოადგენს ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრის დადგენა. პრინციპულად ამ საკითხის ამოხსნას იძლევა შრედინგერის განტოლება

$$H\psi = E\psi, \quad (4.1)$$

სადაც H არის მთელი სისტემის ენერგიის ოპერატორი. იგი შეიცავს კრისტალის იონების კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიის, ელექტრონების კინეტიკური და პოტენციალური ენერგიის, ელექტრონების და იონების ურთიერთქმედების პოტენციალური ენერგიის ოპერატორების ჯამს. ψ სისტემის ტალღური ფუნქციაა, E — ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები. ვინაიდან კრისტალი შეიცავს იონებისა და ელექტრონების ძალიან დიდ რაოდენობას, (4.1) განტოლების ამოხსნა პრაქტიკულად შეუძლებელია. ამიტომ კრისტალში ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრის დასადგენად შემუშავებულ იქნა მრავალი მიახლოებითი მეთოდი, რომელთა შორის ყველაზე პოპულარობა ჰპოვა ზონურმა თეორიამ, ზონურ თეორიაში მრავალი სხეულის პრობლემა დაყვანილია ერთი სხეულის პრობლემაზე, ე. ი. ნაცვლად იმისა, რომ გათვალისწინებული იყოს ელექტრონის ურთიერთქმედება დანარჩენ ელექტრონებთან და იონებთან (მრავალი სხეულის პრობლემა), ზონური თეორია იხილავს ელექტრონის ინდივიდუალურ მოძრაობას $V(r)$ პოტენციალურ ველში (ერთი სხეულის პრობლემა), რომელიც შექმნილია კრისტალური იონების მიერ. ხოლო, რაც შეეხება დანარჩენი $N-1$ — ელექტრონის მოქმედებას აღებულ ელექტრონზე, იგი შეიცვლილია საშუალო მნიშვნელობით, რომელიც მოინახება პარტიკ-ფოკის თვითშეთანხმებული ველის მეთოდით.

მეტალის შემთხვევაში თავისუფალი ელექტრონების რიცხვი იონების რიცხვის რიგისაა, და რადგანაც მათ გააჩნია ერთი და იგივე სიდიდის

ელექტრული მუხტები, მოცემული ელექტრონის დანარჩენ ელექტრონებთან ურთიერთქმედების ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა იგივე რიგისა იქნება, რაც იონებთან ურთიერთქმედების ენერგიის საშუალო მნიშვნელობა. ამიტომ ამ შემთხვევაში ზონური თეორია უნდა იძლეოდეს ცუდ შედეგებს. ცდა კი საკმარისად კარგ შედეგებს იძლევა სწორედ მეტალუბისათვის. ამ წინააღმდეგობის ახსნა პირველად მოგვცა ვანტ-ფლექტმა კვანტური თეორიის საფუძველზე. როგორც ვიცით, ელექტრონული გაზი მეტალებში ძლიერად გადაგვარებული გაზია, ამიტომ მისთვის სამართლიანია მხოლოდ კვანტური სტატისტიკა. ამ სტატისტიკას საფუძვლად უდევს პაულის აკრძალვის პრინციპი, რომლის საფუძველზე შეუძლებელია ელექტრონების ისეთი დაჯახებები (ურთიერთქმედება), რის შედეგად ისინი გადადიან უკვე სხვა ელექტრონებით დაკავებულ მდგომარეობაში. ძლიერად გადაგვარებული გაზის შემთხვევაში კვანტურ მდგომარეობათა დიდი ნაწილი დაკავებულია ელექტრონებით, ამიტომ პაულის აკრძალვის პრინციპის გამო ელექტრონების ეფექტური ურთიერთქმედება ძალზე შემცირებულიად ხდება. სწორედ ამის გამო (4.1) განტოლებაში ელექტრონების ურთიერთქმედების ენერგიის შესაბამისი წევრები შეიძლება უგულებელვყოთ, ანდა, რაც იგივეა, შევცვალოთ იგი მათი საშუალო მნიშვნელობით.

ზონურ თეორიაში მიღებულია აგრეთვე სხვა დაშვებები. მაგალითად, პირველ მიახლოებაში უგულებელყოფილია მესერის იონების სითბური რხევები, ამ დაშვებას არსებითი მნიშვნელობა არა აქვს ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრის დადგენის საკითხში. იონების სითბური რხევების გათვალისწინება აუცილებელია, მაგალითად, ფაზური გადასვლების განხილვის დროს. ზემოთ მოყვანილი გამარტივებათა შემდეგაც კრისტალში ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრის დადგენა მეტად რთულ ამოცანას წარმოადგენს, ამიტომ შემუშავებულ იქნა ამ გამარტივებული ამოცანის ამოხსნის მრავალი მიახლოებითი მეთოდი. მათ შორის აღსანიშნავია: 1. თითქმის თავისუფალი ელექტრონის მიახლოება (პაიერსი), 2. ძლიერად ბმული ელექტრონის მიახლოება, ანდა $LCAO$ მეთოდი (ბლოხი) და სხვ. ზონური თეორიის ფუძემდებლებად ითვლებიან ბლოხი, ბრილუენი, ზეიტცი და სხვ.

§ 1. მისწავნი ელექტრონის ტალღური ფუნქცია

მესერის იონების მიერ შექმნილი პერიოდული ველი აღვნიშნოთ $V(r)$ -ით,

$$V(r+a)=V(r), \quad (4.2)$$

სადაც

$$a = \sum n_i a_i$$

მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორია, $V(r)$ ფუნქციის კონკრეტული სახე ჯერჯერობით არ გვანტერესებს. როგორც შესავალში აღვნიშნეთ, ზონური თეორია ეყრდნობა შრედინგერის შემდეგი განტოლების ამოხსნას

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi(r) = 0, \quad (4.3)$$

ეს განტოლება ინვარიანტულია $r \rightarrow r+a$ გარდაქმნის მიმართ, ამიტომ, თუ აღვნიშნავთ ტრანსლაციის ოპერატორს $T(a)$ -თი, რომელსაც r გადაჰყავს მის ეკვივალენტურ $r+a$ წერტილში, მაშინ (4.3) განტოლების ინვარიანტობის საფუძველზე ჰამილტონიანი H (ენერგიის ოპერატორი) ტრანსლაციის ოპერატორთან კომუტატორია

$$HT(a) = T(a)H. \quad (4.4)$$

მეორე მხრივ, კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ თუ ორი ოპერატორი კომუტატორია, მაშინ მათ ექნებათ საერთო საკუთარი ფუნქციები. საერთო საკუთარ ფუნქციად შეიძლება ავიღოთ $\psi(r)$ ფუნქცია, რომელიც აგვიწერს ელექტრონის სტაციონარულ მდგომარეობას, მაშინ შეგვიძლია დავწეროთ

$$H\psi(r) = \varepsilon\psi(r)$$

და

$$T(a)\psi(r) = c(a)\psi(r), \quad (4.5)$$

სადაც $c(a)$ არის ტრანსლაციის ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა ა მეორე მხრივ

$$T(a)\psi(r) = \psi(r+a) = c(a)\psi(r)$$

და a ვექტორის ნაცვლად ავიღებთ $a+b$ -ს, სადაც a და b მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორებია, მაშინ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\psi(r+a+b) = c(a+b)\psi(r) = c(a)\psi(r+b) = c(a)c(b)\psi(r)$$

ი. ი.

$$c(a+b) = c(a) \cdot c(b). \quad (4.6)$$

ვინაიდან r და $r+a$ წერტილები გამოსახავენ ელექტრონის ფიზიკურად ეკვივალენტურ მდგომარეობებს, ამიტომ

$$|\psi(r+a)| = |\psi(r)|,$$

საიდანაც მიიღება

$$|c(a)| = 1. \quad (4.7)$$

(4.6) და (4.7) დამოკიდებულებები $c(a)$ -თვის გვაძლევენ შემდეგ ამოხსნას:

$$c(a) = e^{ika}. \quad (4.8)$$

მაშასადამე, მესერის ერთი წერტილიდან მის ეკვივალენტურ წერტილში გადასვლისას, ელექტრონის ტალღური ფუნქცია მრავლდება e^{ika} სიდიდზე, ე. ი.

$$\psi(r+a) = e^{ika} \cdot \psi(r). \quad (4.9)$$

ამ დამოკიდებულებას ბლოხის პირობას უწოდებენ. ვინაიდან (4.9) დამოკიდებულება ჩვენ შივილეთ $V(r)$ პერიოდულობის პირობიდან მისი კონკრეტული სახის დამოუკიდებლად, ამიტომ ამ პირობას უნდა აკმაყოფილებდეს აგრეთვე, ნებისმიერ მიახლოებაში დაწერილი ელექტრონის ტალღური ფუნქცია მესერში. თანახმად (4.9) პირობისა, მესერში ელექტრონის ტალღური ფუნქცია შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი სახით:

$$\psi_k(r) = e^{ikr} \cdot u_k(r), \quad (4.10)$$

სადაც $u_k(r)$ არის პერიოდული ფუნქცია

$$u_k(r+a) = u_k(r). \quad (4.11)$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ $\psi_k(r)$ ფუნქციის ასეთი სახე აკმაყოფილებს ბლოხის პირობას, მართლაც

$$\psi_k(r+a) = e^{ik(r+a)} \cdot u_k(r+a) = e^{ika} \cdot e^{ikr} \cdot u_k(r) = e^{ika} \cdot \psi_k(r).$$

თავისუფალი ელექტრონი აიწერება ბრტყელი ტალღით

$$\psi_k = A e^{ikr}.$$

მესერში ელექტრონი კი — ბლოხის ფუნქციით, რომელიც მოცემულია (4.10) ფორმულით. იგი წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას მოდულირებულს $u_k(r)$ პერიოდული ფუნქციით. თავისუფალი ელექტრონის შემთხვევაში შემოპყავთ ტალღური ვექტორი k , რომლის სიდიდეა $2\pi/\lambda$ და მიმართულებით ემთხვევა ტალღის გავრცელების მიმართულებას. მესერში ელექტრონისათვის აგრეთვე შემოგვყავს ტალღური ვექტორის ცნება, რომელიც შემოღის (4.9) ფორმულაში e^{ika} მამრავლის საშუალებით, მასზე ჭერჯელობით არაერთი პირობა არ არის დადებული, გარდა იმისა, რომ ის იყოს არსი რიცხვი. მეორე მხრივ, თუ k ვექტორს დავუმატებთ $2\pi b$ სიდიდეს, სადაც b შებრუნებული მესერის ვექტორია, მაშინ (4.9) დამოკიდებულების სახე არ შეიცვლება, მართლაც

$$ka \rightarrow (k + 2\pi b)a = ka + 2\pi ba,$$

რადგანაც

$$a = \sum n_i a_i \quad \text{და} \quad b = \sum p_i b_i,$$

ამიტომ $ab = \sum n_i p_i$ — მთელი რიცხვია.

მაშასადამე,

$$e^{ika} \rightarrow e^{ika} \cdot e^{i2\pi \times \text{მთ. რიცხვ.}} = e^{ika}.$$

ამრიგად, მესერის ელექტრონის ტალღური ვექტორი ცალსახად არ განისაზღვრება, იგი მოიცემა $2\pi\hbar$ შესაყრებამდე სიზუსტით. ამის გამო, ყოველთვის შეგვიძლია k ვექტორს დაეუმატოთ ისეთი $2\pi\hbar$ სიდიდე, რომ მისი ცვლილება აღმოჩნდეს $-\pi/a$ და π/a ინტერვალში, ე. ი.

$$-\pi < ka_1 < \pi$$

ანდა

$$-\frac{1}{2a} < k/2\pi < \frac{1}{2a}. \quad (4.12)$$

ასეთნაირად განსაზღვრულ k სიდიდეს უწოდებენ დაყვანილ ტალღურ ვექტორს.

თავისუფალი ელექტრონის შემთხვევაში იმპულსსა და ტალღურ ვექტორს შორის არსებობს შემდეგი დამოკიდებულება

$$p = \hbar k.$$

იგივე დამოკიდებულება რჩება მესერის ელექტრონისათვის, მაგრამ მესერის ელექტრონისათვის k განსაზღვრულია $2\pi\hbar$ შესაყრებამდე სიზუსტით. ამიტომ ელექტრონის იმპულსი განსაზღვრული იქნება $2\pi\hbar$ შესაყრებამდე სიზუსტით. მას კვანძი-იმპულსს უწოდებენ.

კვანტურ მექანიკაში ბრტყელი ტალღებისაგან აღგენენ პაკეტს, ე. ი. ტალღათა ჯგუფს, რომელთა ტალღური ვექტორები მოთავსებულია k , $k+dk$ ინტერვალში. ტალღათა პაკეტი დროის რომელიმე მომენტში იძლევა ამპლიტუდის მაქსიმუმს, რომელიც გარკვეული სიჩქარით ინაცვლებს სივრცეში. ტალღათა პაკეტის მაქსიმუმის გადანაცვლების სიჩქარეს ჯგუფურ სიჩქარეს უწოდებენ და მას აიგივებენ ელექტრონის სიჩქარესთან. გამოთვლები ჯგუფური სიჩქარისათვის გვაძლევს შემდეგ ფორმულას

$$v_{\text{გ.}} = \frac{1}{\hbar} \nabla E(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}. \quad (4.13)$$

სრულიად ანალოგიურად, მესერში ელექტრონის შემთხვევაში ბლოხის ფუნქციებისაგან ვადგენთ ტალღურ პაკეტს. ამ პაკეტის ჯგუფურ სიჩქარეს ვაიგივებთ ელექტრონის სიჩქარესთან მესერში. გამოთვლები გვაძლევს იგივე (4.13) ფორმულას, მხოლოდ მესერში ელექტრონის შემთხვევაში $E(k)$ -ს სახე ცნობილი არ არის.

თუ მესერი იდეალურია და გარეშე ველი არ მოქმედებს, მაშინ

$$\frac{dp}{dt} = 0.$$

ეს იმას ნიშნავს, რომ ბლოხის ფუნქცია მესერში ვრცელდება ყოველგვარი დამახინჯების გარეშე (იგულისხმება, რომ მესერი უსასრულო ზომი-

საა). მაგრამ, თუ მესერზე მოდებულია გარეგანი ძალა $\mathbf{F}$ (მაგ. ელექტრო-მაგნიტური), მაშინ

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right). \quad (4.14)$$

კვაზი-იმპულსის ნაცვლად რომ აგველო ნაწილაკის ჩვეულებრივი იმპულსი, (4.14) განტოლების მარჯვენა მხარეში გვექნებოდა სრული ძალა: გარეგანს პლუს შინაგანი ძალა, რომელსაც ქმნიან მესერის იონები და სხვა დანარჩენი ელექტრონები. ეს უკანასკნელი ჩვენთვის ცნობილი არ არის, გარეგანი ძალა კი ცნობილია ყოველ კონკრეტულ შემთხვევაში. კვაზი-იმპულსის შემოტანა ჩვენ გვათავისუფლებს შინაგანი ძალისაგან. სწორედ ამაში მდგომარეობს მისი უპირატესობა. ჩვენ ქვემოთ ვუჩვენებთ, რომ კვაზიიმპულსის შემოტანა ფაქტიურად ეფექტური მასის შემოტანის ეკვივალენტურია.

§ 2. მუშაობრივი მასა. მუშაობრივი მასის მეთოდი

ელექტრონის სიჩქარე მესერში

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial \mathbf{k}}$$

ანდა, კომპონენტებში

$$v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k_i} \quad i=1, 2, 3.$$

როდესაც ელექტრონზე მოქმედებს გარეგანი ძალა, მაშინ $k=k(t)$, ანდა $E(k)=E(t)$, ამიტომ აჩქარების კომპონენტებისათვის გვექნება

$$\dot{v}_i = \frac{1}{\hbar} \sum \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_n} \dot{k}_n$$

მეორე მხრივ

$$\dot{\mathbf{p}} = \hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}.$$

ამიტომ

$$\dot{v}_i = \frac{1}{\hbar^2} \sum \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_n} \cdot F_n. \quad (4.15)$$

(4.15) ფორმულა გვაძლევს კავშირს მესერში ელექტრონის აჩქარებასა და მასზე მოქმედ ძალას შორის, კლასიკურ მექანიკაში ნაწილაკის აჩქარება პირდაპირპროპორციულია ძალისა და უკუპროპორციულია მასისა. ამიტომ, თუ გვინდა მესერში ელექტრონის მეტად რთულ მოძრაობასა და კლასიკური ნაწილაკის მოძრაობას შორის გავატაროთ ანალოგია, მაშინ (4.15) განტოლებაში F_n -ის წინ მდგომი კოეფიციენტის შებრუნებული სიდიდე უნდა მივიღოთ მასის ანალოგად და ვუწოდოთ ელექტრონის განზოგადებული ეფექტური მასა m^* . ეს უკანასკნელი k -ს ფუნქციაა, რადგანაც $E=E(k)$, მაგრამ მცირე k -ს შემთხვევაში, თუ $E(k)$ -ს დავშლით

მწკრივად k -ს ხარისხებად და შემოვისაზღვრებით k^2 წევრებით, მაშინ m^* k -სგან დამოკიდებული არ იქნება. ეუწოდოთ მას ეფექტური მასა. ამრიგად

$$\frac{1}{m_{in}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_l \partial k_n}, \quad (4.16)$$

მაშინ

$$\dot{v}_l = \sum F_n / m_{in}^*.$$

m_{in}^* არის ეფექტური მასის ტენზორის (i, l) კომპონენტები. კერძოდ, თუ ეფექტური მასა იზოტროპიულია, მაშინ ტენზორის ყველა კომპონენტი ნულის ტოლია, გარდა დიაგონალური წევრებისა

$$(m_{in}^*) = \begin{pmatrix} m^* & 0 & 0 \\ 0 & m^* & 0 \\ 0 & 0 & m^* \end{pmatrix}$$

ე. ი.

$$m_{in}^* = m^* \delta_{in}, \quad m^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad (4.17)$$

ამ დროს (4.16) განტოლება გვაძლევს

$$\dot{v}_l = F_l / m^* \quad \text{ან} \quad m^* \dot{v}_l = F_l. \quad (4.18)$$

ეს უკანასკნელი არის ნიუტონის მოძრაობის განტოლება, სადაც ელექტრონის ნამდვილი მასის ნაცვლად დგას მისი ეფექტური მასა, ეფექტურ მასას არავითარი კავშირი არა აქვს მასის როგორც ინერტულობის ზომასთან. იგი შემოტანილია მესერში ელექტრონის რთულ მოძრაობასა და კლასიკური ნაწილაკის მოძრაობათა შორის მხოლოდ ანალოგიის გასატარებლად. ამიტომ ეფექტურ მასას შეიძლება ჰქონდეს როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი მნიშვნელობა. აღსანიშნავია ის გარემოება, რომ ცდაზე (ციკლოტრონული რეზონანსი) გაიზომება ელექტრონის არა ნამდვილი, არამედ ეფექტური მასა (უფრო სწორად, m^*/m შეფარდება).

ახლა ვუჩვენოთ, რომ კვაზი-იმპულსის შემოტანა ეფექტური მასის შემოტანის ეკვივალენტურია. ამ დებულების დასამტკიცებლად განვიხილოთ ელექტრონის მოძრაობა $V(r)$ პერიოდულ ველში, რომელიც აიწეება შრედინგერის შემდეგი განტოლებით:

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi(r) = 0, \quad (4.19)$$

სადაც m არის ელექტრონის ნამდვილი მასა. ამ განტოლების პარალელურად განვიხილოთ განტოლება, რომელშიაც პერიოდული ველი გადაგდებულია, სამაგიეროდ ელექტრონის ნამდვილი მასა შეცვლილია ეფექტური მასით

$$\Delta \psi_0 + \frac{2m^*}{\hbar^2} E_0 \psi_0 = 0. \quad (4.20)$$

ამ განტოლების ამოხსნაა

$$\psi_0 = \Omega^{-1/2} e^{ikr}$$

და

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

ზოგორც ვიცით, (4.19) განტოლების ამოხსნას შეადგენს ბლოხის ფუნქცია

$$\psi_k = e^{ikr} \cdot u_k(r).$$

ენერგიის სპექტრი $E = E(k)$ ჩვენთვის უცნობია, მაგრამ მცირე k -ს შემთხვევაში იგი შეიძლება დავშალოთ მწკრივად, k -ს ხარისხებად

$$E(k) = E(0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)_0 k^2 + \dots$$

ანდა

$$E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2,$$

მაშასადამე, მცირე k -ს შემთხვევაში ზუსტი (4.19) და მიახლოებითი (4.20) განტოლებები გვაძლევენ ერთი და იგივე ენერგეტიკულ სპექტრს. შრედინგერის განტოლების ამოხსნის დროს ჩვენ გვანტერესებს არა მარტო ენერგიის სპექტრი, არამედ ტალღური ფუნქციებიც, რომელთა საშუალებით მოიძებნება ერთა კვანტური მდგომარეობიდან მეორეში გადასვლის მატრიცული ელემენტები. პეკარმა განიხილა შრედინგერის უფრო ზოგადი განტოლება, რომელიც გარდა $V(r)$ პერიოდული პოტენციალისა, შეიცავს აგრეთვე $U(r)$ არაპერიოდულ პოტენციალს. ამ განტოლებას ადარებს გამარტივებულ განტოლებას, რომელშიც პერიოდული ველი გადაგდებულია, ხოლო ელექტრონის ნამდვილი მასა შეცვლილია ეფექტური მასით. იგი ამტკიცებს, რომ, როდესაც $U(r)$ ძალიან მცირედ იცვლება მესერის პერიოდის მანძილზე, მაშინ, თუ შემოვისაზღვრებით k^2 სიზუსტით, ეს ორი განტოლება ერთმანეთის ეკვივალენტური იქნება. მეორე მხრივ, $V(r)$ პოტენციალის პერიოდულობის გამო, ელექტრონის ტალღური ვექტორი მესერში ცალსახა არაა. $2\pi b$ სიდიდის დამატებით მესერში ელექტრონის ტალღური ვექტორი — დაყვანილი ტალღური ვექტორი, ცალსახა ხდება — $\pi/a < k < \pi/2$ ინტერვალში. მაშასადამე, დაყვანილი ტალღური ვექტორის ანდა კვაზი-იმპულსის შემოტანა ფაქტიურად გვანთავისუფლებს კრისტალის პერიოდული ველისაგან. მაშასადამე, კვაზი-იმპულსის შემოტანა ეფექტური მასის შემოტანის ეკვივალენტურია. ქვემოთ განხილულია რამდენიმე მიახლოებული მეთოდი, რომლებიც გვიჩვენებენ, რომ მესერში ელექტრონის სპექტრი შედგება დასაშვები და აკრძალული ზონებისაგან.

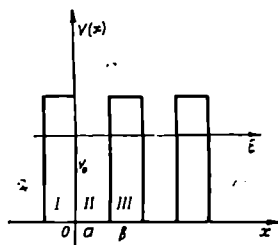
§ 3. კრონიგ-პენის ერთგანზომილებიანი ამოცანა

კრისტალში ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრის საილუსტრაციოდ, კრონიგ-პენი იხილავს პოტენციალური ველის კონკრეტულ სახეს ერთგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში, რომელიც ნაჩვენებია ნახ. 31-ში. ამ შემთხვევაში, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, სათანადო შრედინგერის განტოლება

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \quad (4.20)$$

ზუსტად ამოიხსნება. ჩვენ გვინტერესებს (4.20) განტოლების ამოხსნა $E < V_0$ შემთხვევაში, ეს უკანასკნელი აღნიშნავს მესერის პოტენციალურ ორმოში მოთავსებულ ელექტრონს, ხოლო $E > V_0$ — თავისუფალ ელექტრონს, რომლის ენერგეტიკული სპექტრი უწყვეტია.

ვთქვათ ელექტრონი მოთავსებულია II ორმოში. ელექტრონს, ტალღური ბუნების გამო, შეუძლია გარკვეული ალბათობით გავიდეს V_0 სიმაღლისა და b სიგანის ბარიერში და აღმოჩნდეს მომდევნო პოტენციალურ ორმოში და ა. შ. ვინაიდან ტალღური ფუნქცია უნდა იყოს უწყვეტი ერთი არიდან მეორეში გადასვლის დროს, ამისათვის საჭიროა მოინახოს (4.20) განტოლების ამოხსნა I, II, III არეებში და შემდეგ შეიყარას $x=0$ და $x=a$ წერტილებში, ამრავად



ნახ. 31

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2\psi = 0 \quad V=0 \text{ არეში} \quad (4.21)$$

და

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \lambda^2\psi = 0 \quad V=V_0 \text{ არეში}, \quad (4.22)$$

სადაც

$$\kappa^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \lambda^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E). \quad (4.23)$$

(4.21) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს $e^{i\kappa x}$ და $e^{-i\kappa x}$, ხოლო (4.22) განტოლებისა — $e^{\lambda x}$ და $e^{-\lambda x}$.

ვინაიდან შრედინგერის განტოლება წარფივია, ამიტომ I, II, III არეებში ამოხსნები ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned}
 -b < x < 0 & \quad \psi_1 = \gamma e^{\lambda x} + \delta e^{-\lambda x} \\
 0 < x < a & \quad \psi_2 = \alpha e^{i\lambda x} + \beta e^{-i\lambda x} \\
 a < x < a+b & \quad \psi_3 = \gamma' e^{\lambda x} + \delta' e^{-\lambda x}
 \end{aligned}
 \tag{4.24}$$

$x=0$ წერტილში შეკერვის პირობას შეადგენს

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad \text{და} \quad \psi_1'(0) = \psi_2'(0). \tag{4.25}$$

ასევე, $x=a$ წერტილში შეკერვის პირობას შეადგენს

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad \text{და} \quad \psi_2'(a) = \psi_3'(a). \tag{4.26}$$

ამრიგად (45) და (46) პირობები გვაძლევენ ოთხ დამოკიდებულებას ექვს უცნობ $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \gamma'$ და δ' სიდიდეებს შორის. მაგრამ ოთხი პირობა საშუალებას არ იძლევა განესაზღვროთ 6 სიდიდე. ამისათვის საჭიროა კიდევ ორი პირობა. ეს დამატებითი კავშირი უცნობ კოეფიციენტებს შორის მიიღება ბლოხის პირობის გამოყენებით. ბლოხის პირობა (4.9) აკავშირებს ერთმანეთს ψ_1 და ψ_3 ფუნქციებს შემდეგი სახით

$$\psi_3(x+c) = e^{i\lambda c} \psi_1(x).$$

თუ ამ უკანასკნელში შევითანთ ψ_3 და ψ_1 მნიშვნელობებს მოცემულს (4.24) ფორმულებით, მივიღებთ:

$$\gamma' e^{\lambda(x+c)} + \delta' e^{-\lambda(x+c)} = e^{i\lambda c} (\gamma e^{\lambda x} + \delta e^{-\lambda x})$$

ანღა

$$e^{\lambda x} (\gamma' e^{\lambda c} - \gamma e^{i\lambda c}) + e^{-\lambda x} (\delta' e^{-\lambda c} - \delta e^{i\lambda c}) = 0$$

ეს ტოლობა შესრულდება ნებისმიერი x -თვის, თუ

$$\gamma' = \gamma e^{i\lambda c - \lambda c} \quad \text{და} \quad \delta' = \delta e^{i\lambda c + \lambda c}$$

ამრიგად

$$\psi_3 = \gamma e^{i\lambda c + \lambda(x-c)} + \delta e^{i\lambda c - \lambda(x-c)}.$$

შეკერვის (25) და (26) პირობები გვაძლევენ:

1. $\alpha + \beta - \gamma - \delta = 0$
2. $i\lambda \cdot \alpha - i\lambda\beta - \lambda\gamma + \lambda\delta = 0$
3. $e^{i\lambda a} \cdot \alpha + e^{-i\lambda a} \beta - e^{i\lambda c - \lambda b} \cdot \gamma + e^{i\lambda c + \lambda b} \cdot \delta = 0$
4. $i\lambda e^{i\lambda a} \cdot \alpha - i\lambda e^{-i\lambda a} \beta - \lambda e^{i\lambda c - \lambda b} \cdot \gamma + \lambda e^{i\lambda c + \lambda b} \cdot \delta = 0$

(4.27)

ამრიგად, მივიღეთ α, β, γ და δ კოეფიციენტების განსაზღვრისათვის ოთხი ერთგვაროვანი განტოლება (4.27). ამ განტოლებათა სისტემას ნულისაგან განსხვავებული ამოხსნები ექნებათ მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როდესაც სისტემის დეტერმინანტი ნულის ტოლია, ე. ი.

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ ix & -ix & -\lambda & +\lambda \\ e^{ixa} + e^{-ixa} & -e^{ikc-\lambda b} & -e^{ikc+\lambda b} \\ ix e^{ixa} - ix e^{-ixa} & -\lambda e^{ixa-\lambda b} + \lambda e^{ikc+\lambda b} \end{vmatrix} = 0 \quad (4.28)$$

ამ ლეტერმინანტის გახსნა გვაძლევს:

$$\operatorname{ch} \lambda b \cdot \cos \alpha a + \frac{\lambda^2 - \alpha^2}{2\alpha\lambda} \operatorname{sh} \lambda b \cdot \sin \alpha a = \cos kc. \quad (4.29)$$

ელექტრონის ენერგიას შეიცავენ λ და α სიდიდეები. ამიტომ (4.29) გვაძლევს ენერგიის დამოკიდებულებას a , b , V_0 და k სიდიდეებისაგან

$$E = E(abkV_0).$$

(4.29) განტოლებაში ელექტრონის ტალღური ვექტორი λ შედის მხოლოდ მარჯვენა მხარეში $\cos kc$ -ს სახით. ამიტომ, თუ მოვახდენთ ჩანაცვლებას $k \rightarrow k + \frac{2\pi}{c} \cdot n$, (4.29) განტოლება, და მამასადამე, ელექტრო-

ნის ენერგია არ შეიცვლება $E\left(k + n \frac{2\pi}{c}\right) = E(k)$. ეს გასაგებია, რადგანაც k ვექტორი განსაზღვრულია მესერში $2\pi b$ შესაქარებად სიზუსტით (ერთგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში $b = \frac{1}{c} \cdot n$). (4.29) განტოლების სირთულის გამო ძნელია ვიმსჯელოთ ელექტრონის ენერგიის სპექტრის სახეზე, ამიტომ ამ განტოლების გამარტივების მიზნით განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც

$$b \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty \text{ მასთან } V_0 b \rightarrow \text{const.}$$

ამ შემთხვევაში შეგვიძლია მიახლოებით დავწეროთ

$$c \rightarrow a, \lambda^2 - \alpha^2 \rightarrow \lambda^2. \operatorname{ch} \lambda b \approx 1 \text{ და } \operatorname{sh} \lambda b \approx \lambda b.$$

ამ დაშვების საფუძველზე, (29) განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\cos \alpha a + \frac{\lambda^2 b}{2\alpha} \sin \alpha a = \cos ka,$$

ანდა

$$\cos x + p \frac{\sin x}{x} = \cos ka, \quad (4.30)$$

სადაც

$$x = \alpha a$$

და

$$p = \frac{\lambda^2 ab}{2} = \frac{mV_0 ab}{\hbar^2}. \quad (4.31)$$

ფეიოთ (4.30) განტოლების გრაფიკული ამოხსნა. ამისათვის ამ განტოლების მარჯვენა მხარე აღვნიშნოთ $f(x)$ -ით.

$$f(x) = \cos x + p \frac{\sin x}{x} = \cos ka. \quad (4.30 a)$$

მაშინ

$$f(0) = 1 + p$$

$$f(x \gg 1) = \cos x$$

$$f(x = n\pi) = \cos n\pi = (-1)^n, \quad n = 1, 2.$$

$f(x)$ ფუნქცია ღებულობს ± 1 მნიშვნელობებს, გარდა $x = n\pi$ წერტილებისა აგრეთვე სხვა წერტილებშიც. რომ მოვწახოთ x -ის ეს მნიშვნელობები, შემოვიტანოთ აღნიშვნა:

მაშინ

$$\operatorname{tg} \varphi = p/x.$$

$$\begin{aligned} f(x) &= \cos x + \sin x \cdot \operatorname{tg} \varphi = \frac{\sin \varphi \cdot \sin x + \cos \varphi \cos x}{\cos \varphi} = \\ &= \frac{\cos(x - \varphi)}{\cos \varphi} = (-1)^n, \end{aligned}$$

ანდა

$$\cos(x - \varphi) = (-1)^n \cdot \cos \varphi.$$

აქედან ვღებულობთ

$$x - \varphi = \begin{cases} n\pi - \varphi \\ n\pi + \varphi \end{cases} \quad \varphi < \pi/2$$

ცხრილი 4

x	$f(x)$
0	$1+p$
2φ	$+1$
π	-1
$\pi+2\varphi$	-1
2π	$+1$
$2\pi+2\varphi$	$+1$
—	—

ამრიგად $f(x) = (-1)^n$, როდესაც $x = n\pi$ და $x = n\pi + 2\varphi$, სადაც $n = 0, 1, 2, \dots$

$f(x)$ -ს რიცხვითი მნიშვნელობები მოცემულია მე-4 ცხრილში.

ვინაიდან $|\cos ka| \leq 1$, ამიტომ დასაშვებია x -ის ის მნიშვნელობები, რომლისათვის $|f(x)| \leq 1$.

ნახ. 32-ზე მოცემულია $f(x)$ ფუნქციის გრაფიკი.

თანახმად ნახ. 32-ისა, AA' , BB' , CC' და ა. შ.

ინტერვალში x -ის, ანდა ენერგიის მნიშვნელობებს

ეთანადებთან $|f(x)| \leq 1$, ამიტომ ენერგიის ეს მნიშვნელობები დასაშვებია, ხოლო $A'B$, $B'C$ და ა. შ.

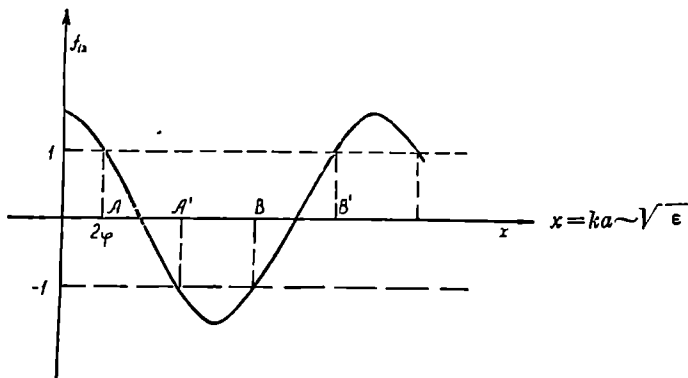
ინტერვალის შიგნით x -ის ანდა ენერგიის მნიშვნელობებს ეთანადებთან $|f(x)| \geq 1$; ამიტომ ენერგიის ეს მნიშვნელობები აკრძალულია. მაშასადამე, მესერში ელექტრონის სპექტრი შედგება აკრძალული და დასაშვები ზონებისაგან. x -ის, ანდა ენერგიის ის მნიშვნელობები, რომლებიც ეთანადებთან აკრძალულ ან დასაშვებ ზონებს, გამოისახებიან შემდეგი უტოლობით:

$$(n-1)\pi < x < (n-1)\pi + 2\varphi - \text{აკრძალული ზონები} \quad (4.32)$$

$$(n-1)\pi + 2\varphi < x < n\pi - \text{დასაშვები ზონები}$$

$n=1, 2, 3, \dots$ არის ზონის ნომერი. თანახმად ნახ. 32-ისა, აკრძალული ზონა იწყება ენერგიის იმ მნიშვნელობებზე, რომელიც განისაზღვრება $x = x_a = n\pi$ პირობიდან და ტოლია

$$E_n = \frac{\hbar^2 x^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{a^2}. \quad (4.33)$$



ნახ. 32

2φ წარმოადგენს აკრძალული ზონის სიგანეს

$$2\varphi = 2 \operatorname{artg} \frac{p}{x} = 2 \operatorname{artg} \frac{p}{n\pi}. \quad (4.34)$$

თანახმად (34) ფორმულისა, ზონის ნომრის, ანდა რაც იგივეა, ელექტრონის ენერგიის გადიდებით სილიდე 2φ მცირდება და უტოლდება ნულს, როდესაც $n \rightarrow \infty$. ეს შედეგი აღვილი გასაგებია, რადგანაც ძალიან დიდი ენერგიის შემთხვევაში ელექტრონი უახლოვდება თავისუფალი ელექტრონის მდგომარეობას, რომლისათვის ენერგიის სპექტრი უწყვეტია. თანახმად (4.30) დამოკიდებულებისა, როდესაც $x = x_a = n\pi$ -ს, $x = k$, მაშასადამე, როდესაც ტალღური ვექტორი $k = n \frac{\pi}{a}$, იწყება აკრძალული ზო-

ნა, ამ დროს ენერგია განიცდის წყვეტას გარკვეულ სიდიდეზე (ნახ. 33). ტალღური ვექტორის ას მნიშვნელობები, რომლებიც მოთაესებულია ინტერვალში

$$-\pi/a < k < \pi/a \quad (4.35)$$

ანდა

$$-\frac{1}{2a} < k/2\pi < \frac{1}{2a}$$

აღგენს ბრილუენის პირველ ანდა ცენტრალურ ზონას. ამ ზონის შიგნით ენერგია k -ს უწყვეტი ფუნქციაა. ტალღური ვექტორის ის მნიშვნელობები, რომლებიც მოთავსებულია ინტერვალში

$$\pi/a < k < 2\pi/a$$

და

$$-\frac{2\pi}{a} < k < -\pi/a.$$

ანდა

$$\frac{1}{2a} < k/2\pi < \frac{1}{a}$$

და

$$-\frac{1}{a} < k/2\pi < -\frac{1}{2a} \quad (4.36)$$

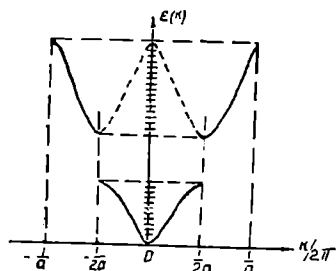
აღგენს ბრილუენის მეორე ზონას და ა. შ.

ყოველი ზონის შიგნით ენერგია k -ს უწყვეტი ფუნქციაა, ხოლო ერთი ზონიდან მეორეზე გადასვლისას ენერგია განიცდის წყვეტას. თუ k ვექტორში ვიგულისხმებთ დაყვანილ ვექტორს,

რომელიც განისაზღვრება $\frac{2\pi}{c} \cdot n$

შესაყრებამდე სიზუსტით, მაშინ ბრილუენის ყველა ზონა მოთავსებული იქნება ცენტრალურ ზონაში, სადაც

$$-\frac{1}{2a} < k/2\pi < \frac{1}{2a}.$$



ნახ. 33

მართლაც, თუ მეორე ზონის მარჯვე-
ნა შტოს შესაბამის ტალღურ ვექტ-

ტორს დავუმატებთ $-\frac{1}{a}$ -ს, მაშინ ეს შტო აღმოჩნდება $(-\frac{1}{2a}, 0)$

ინტერვალში. ასევე, თუ მეორე ზონის მარცხენა შტოს შესაბამის ტალ-
ღურ ვექტორს დავუმატებთ $\frac{1}{a}$ -ს, იგი აღმოჩნდება $(0, \frac{1}{2a})$ ინტერ-

ვალში. მაშასადამე $k \rightarrow k \pm \frac{1}{a}$ გარდაქმნის შედეგად ბრილუენის მეო-

რე ზონა აღმოჩნდება ცენტრალურ ზონაში. ანალოგიურად, ბრილუენის ყველა ზონა $k \rightarrow k \pm n \cdot \frac{1}{a}$ ჩანაცვლების შედეგად აღმოჩნდება ცენტრალური ზონის შიგნით (ნახ. 33-ზე ნაჩვენებია პუნქტირით).

საბოლოო შედეგი ასეთია: როდესაც ვიხილავთ არადაყვანილ ტალღურ ვექტორს, მიიღება ბრილუენის მრავალი ზონა. თითოეული ზონის შიგნით ენერგია უწყვეტია, ამასთან, ცალსახა ფუნქციას k -სი, ხოლო ერთი ზონიდან მეორეზე გადასვლისას ენერგია განიცდის წყვეტას. როდესაც ვიხილავთ დაყვანილ ტალღურ ვექტორს, ყველა ზონა ცენტრალური ზონის შიგნითაა მოთავსებული, ამ დროს ენერგია ზონის შიგნით მრავალსახა ფუნქციას k -სი. პირველი შემთხვევის განხილვა ხელსაყრელია მაშინ, როდესაც ელექტრონი სუსტად არის ბმული მესერში, ე. ი. როდესაც ელექტრონი ახლოსაა თავისუფალი ელექტრონის მდგომარეობასთან. მეორე შემთხვევის განხილვა ხელსაყრელია მაშინ, როდესაც ელექტრონი ძლიერად არის ბმული სათანადო ატომთან.

ნახ. 33-ის თანახმად, ზონის ნაპირებზე მრუდის დახრა, ე. ი. $\frac{\partial E}{\partial k} = 0$,

ამიტომ, თანახმად (4.13) ფორმულისა, აკრძალული ზონის მიახლოებისას ელექტრონის სიჩქარე უტოლდება ნულს. ფიზიკურად ეს ნიშნავს შემდეგს: როდესაც ტალღური ვექტორი უახლოვდება $\pm n \cdot \pi/a$ სიდიდეს, მიიღება ერთი და იგივე ინტენსივობის ორი ტალღა — დაცემული და არეკლილი რაიმე კრისტალური ზედაპირიდან (ბრილუენის ზედაპირებიდან, იხ. ქვემოთ). ამ ორ ტალღათა ინტერფერენცია გვაძლევს მდგარ ტალღას, უქანასკნელი კი, როგორც ვიცით, აღარ ვრცელდება; $v=0$.

დავუშვათ, რომ $\alpha = 2\pi/\lambda$; სადაც λ არის დე-ბროილის ტალღის სიგრძე თავისუფალი ელექტრონისათვის, მაშინ დამოკიდებულება $\alpha a = n\pi$ გვაძლევს $2a = n\lambda$.

ეს უქანასკნელი კი წარმოადგენს ბრეგის კოჰერენტულ არეკვლას კრისტალური ზედაპირებიდან. მაშასადამე, აკრძალული ზონის წარმოშობა დაკავშირებულია ბრეგის კოჰერენტულ არეკვლასთან.

ახლა განვიხილოთ (30) ფორმულის ორი კერძო შემთხვევა:

ა) $p=0$, მაშინ $f(x) = \cos x = \cos \alpha a = \cos \alpha a$.

აქედან

$$\alpha = k \text{ და } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

ამ დროს x -ის ყველა მნიშვნელობისათვის $|f(x)| \leq 1$, ე. ი. ენერგიის ყველა მნიშვნელობა დასაშვებია, ეს არის სრულიად თავისუფალი ელექტრონის შემთხვევა.

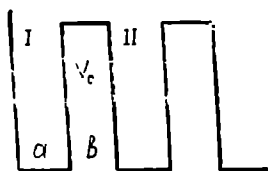
ბ) $p = \infty$, მაშინ, თანახმად (4.3) ფორმულისა, ვღებულობთ:

$$x = x_a = n\pi \quad \text{და} \quad \varepsilon_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

ენერგია ღებულობს დისკრეტულ მნიშვნელობებს. ეს არის სრულიად ბმული ელექტრონის შემთხვევა. მაშასადამე p -ს მნიშვნელობები, მოთავსებული 0 და ∞ შორის, გვაძლევს ელექტრონის ბმის სიდიდეს სათანადო ატომთან:

$$p = \frac{mV_0 \cdot a \cdot b}{\hbar^2}.$$

p -ს დამოკიდებულება V_0 და b სიდიდეებთან საცესებით ნათელია (გამხილული იყო ზემოთ). ახლა გავარჩიოთ, რატომ არის p დამოკიდებული a სიდიდეზე. ამისათვის განვიხილოთ ორი მეზობელი პოტენციალური ორმო (ნახ. 34).



ნახ. 34

ვთქვათ, ელექტრონი მოთავსებულია პირველ ორმოში. თუ $V_0 = \infty$, მაშინ ეს ელექტრონი მუდამ ამ ორმოში დარჩება, მაგრამ თუ V_0 სასრული სიდიდეა, მაშინ ელექტრონი გარკვეული ალბათობით შეიძლება გადავიდეს ერთი ორმოდან მეორეში. გადასვლის ალბათობა მით მეტია,

რაც მეტად გადაფარავენ მეზობელი ორმოების ელექტრონის ტალღური ფუნქციები. ცხადია რომ, რაც უფრო მცირეა a , მით მეტად გადაფარავენ მეზობელი ორმოების ელექტრონის ტალღური ფუნქციები და, მაშასადამე, მით უფრო კოლექტივიზირებული ხდება ელექტრონი მესერში.

§ 4. თითქმის თავისუფალი ელემენტარონის მიახლოება

დავუშვათ, რომ მესერის ველში ელექტრონის პოტენციალური ენერგია ბევრად ნაკლებია მის კინეტიკურ ენერგიაზე. ამ შემთხვევაში შრედინგერის განტოლებაში

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi(r) = 0. \quad (4.37)$$

$V(r)$ შეიძლება განვიხილოთ როგორც მცირე შეშფოთება და ვეძიოთ ამ განტოლების ამოხსნა შრედინგერის შეშფოთების თეორიის მიხედვით. თანახმად ამ თეორიისა, ნულოვან მიახლოებაში $V(r)$ პოტენციალს უგულებელყოფენ, მაშინ (4.37) განტოლების ამოხსნა იქნება

$$\psi_0 = \Omega^{-1/2} e^{ikr}$$

და

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.38)$$

შემდეგი მიახლოების მისაღებად $V(r)$ პოტენციალს შლიან ფურიეს სამმაგ მწკრივად

$$V(r) = \sum_b V_b e^{i\pi b r}, \quad (4.39)$$

სადაც

$$V_b = \Omega^{-1} \int V(r) e^{-i\pi b r} dr \quad (4.40)$$

არის ფურიეს დაშლის კოეფიციენტები. (4.39) ფორმულაში $\sum_b$ არის აღნიშვნა სამმაგი ჯამისა b_1, b_2 და b_3 კომპონენტებით. ნულოვანი მიახლოების ψ_0 ფუნქციის საშუალებით შრედინგერის შეშფოთების თეორია საშუალებას იძლევა გამოეთვალოთ ენერგიის პირველი და მეორე შესწორებები: ენერგიის პირველი მიახლოება გამოითვლება შემდეგი ფორმულით:

$$E_1 = \int \psi_0^* V(r) \psi_0 dr = \Omega^{-1} \int V(r) dr.$$

თუ ამ უკანასკნელს შევადარებთ (4.40) ფორმულას, მივიღებთ:

$$E_1 = V_{000} \quad (b=0), \quad (4.41)$$

ე. ი. ენერგიის პირველი შესწორება უდრის ფურიეს კოეფიციენტს, რომლისათვის $b=0$. ენერგიის შესწორება მეორე მიახლოებაში შრედინგერის თეორიაში გამოითვლება შემდეგი ფორმულით

$$E_2 = \sum_{k'} \frac{|V_{kk'}|^2}{\epsilon_0(k) - \epsilon_0(k')}, \quad (4.42)$$

სადაც

$$V_{k'k} = \int \psi_{0k'}^* V \psi_{0k} dr \quad (4.43)$$

არის შეშფოთების ენერგიის (k', k) მატრიცული ელემენტები, თუ (4.43) ფორმულაში შევიტანთ $\psi_{0k'}$ და ψ_{0k} -ს მნიშვნელობებს, მივიღებთ

$$V_{k'k} = \Omega^{-1} \sum_b V_b \int e^{i(k-k'+2\pi b)r} dr.$$

ინტეგრალქვეშა სიდიდე პერიოდული ფუნქციაა, ამიტომ თუ ინტეგრირება ხდება საკმარის დიდ მოცულობაში, მაშინ ეს ინტეგრალი ყოველთვის ნულის ტოლია, გარდა

$$k - k' + 2\pi b = 0.$$

ამ დროს

$$V_{k'k} = \begin{cases} 0 & \text{როდესაც } k - k' + 2\pi b \neq 0 \\ V_b & k - k' + 2\pi b = 0 \end{cases} \quad (4.44)$$

საბოლოოდ, ენერგიის მეორე მიახლოებაში შესწორებისათვის მიიღება შემდეგი გამოსახულება

$$E_2(k) = \sum_b \frac{|V_b|^2}{E_0(k) - E_0(k + 2\pi b)} \quad (4.45)$$

რადგანაც

$$\begin{aligned} E_0(k) - E_0(k + 2\pi b) &= \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (k + 2\pi b)^2) = \\ &= -\frac{2\pi\hbar^2}{m} (k + \pi b, b), \end{aligned}$$

ამიტომ

$$E_2(k) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_b \frac{|V_b|^2}{(k + \pi b, b)} \quad (4.46)$$

შრედინგერის შემოფოტების თეორია მაშინ გამოიყენება, როდესაც ენერგიის შესწორებები ბევრად ნაკლებია ნულოვან მიახლოებასთან შედარებით, ე. ი. $E_2 \ll E_0$. წინააღმდეგ შემთხვევაში ამ მეთოდის გამოყენებას აზრი არა აქვს. იმისათვის, რომ $E_2 \ll E_0$, საჭიროა ორი პირობის შესრულება: 1) V_b — იყოს მცირე, ეს ყოველთვის შესრულებულია, თუ $V(r)$ პოტენციალი წარმოადგენს მცირე შემოფოტებას, 2) $(k + \pi b, b)$ მცირე არ იყოს. ეს პირობა k -ს ზოგიერთი მნიშვნელობისათვის შეიძლება აღარ შესრულდეს. შეიძლება ვუჩვენოთ, რომ პირობა $(k + \pi b, b) = 0$, ანდა $k + \pi b \perp b$ -ს წარმოადგენს k ტალღური ვექტორის ტალღის ბრეგის ჯოპერენტულ არეკვლას ზედაპირიდან, რომელიც განისაზღვრება შებრუნებული ვექტორით

$$b = \sum p_i b_i,$$

სადაც p_1, p_2 და p_3 მოცემულ სიბრტყეთა მიღერის ინდექსებია. როდესაც ბრეგის პირობა ზუსტად ან მიახლოებით სრულდება, გვაქვს თითქმის გადაგვარებული მდგომარეობა $E_k = E_{k+2\pi b}$, ამ შემთხვევაში შრედინგერის თეორიის თანახმად, ნულოვანი მიახლოების ფუნქციად უნდა იყოს აღებული წრფივი კომბინაცია ψ_k და $\psi_{k+2\pi b}$ ფუნქციებისა, ე. ი.

$$\psi = \alpha\psi_k + \beta\psi_{k+2\pi b} \quad (4.47)$$

ამის შემდეგ ენერგიის გამოთვლა მიმდინარეობს ჩვეულებრივი წესით

$$H\psi = E\psi, \quad (4.48)$$

სადაც

$$H = H_0 + V \quad (4.49)$$

$$H_0 \psi_k = E_k \psi_k \quad \text{და} \quad H_0 \psi_{k+2\pi b} = E_{k+2\pi b} \psi_{k+2\pi b}$$

თუ H -ს და ψ -ს მნიშვნელობებს შევიტანთ (3.48) განტოლებაში და მხედველობაში მივიღებთ (4.49) დამოკიდებულებებს, მივიღებთ

$$(H_0 + V)(\alpha\psi_k + \beta\psi_{k+2\pi b}) = E(\alpha\psi_k + \beta\psi_{k+2\pi b})$$

ანდა

$$\begin{aligned} \alpha E_k \psi_k + \beta E_{k+2\pi b} \psi_{k+2\pi b} + \alpha V \psi_k + \beta V \psi_{k+2\pi b} = \\ = \alpha E \psi_k + \beta E \psi_{k+2\pi b} \end{aligned} \quad (A)$$

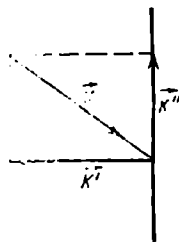
თუ ტოლობის ორივე მხარეს გავამრავლებთ ψ_k^* და შემდეგ მოვახდენთ ინტეგრირებას კრისტალის მთელ მოცულობაში, მივიღებთ:

$$\alpha(E_k + V_{000} - E) + \beta V_b = 0.$$

ასევე, თუ (A) ტოლობის ორივე მხარეს გავამრავლებთ $\psi_{k+2\pi b}^*$ და შემდეგ მოვახდენთ ინტეგრირებას, მივიღებთ

$$\alpha V_b + (E_{k+2\pi b} + V_{000} - E)\beta = 0.$$

ამრიგად, მივიღეთ ორი ერთგვაროვანი განტოლება α და β კოეფიციენტების განსაზღვრისათვის, α და β კოეფიციენტების ნულისაგან განსხვავებული ამოხსნა მიიღება იმ შემთხვევაში, თუ



ნახ. 35

$$\begin{vmatrix} E_k + V_{000} - E, & V_b \\ V_b, & E_{k+2\pi b} + V_{000} - E \end{vmatrix} = 0.$$

დეტერმინანტის ამოხსნა იძლევა E -ს ორ მნიშვნელობას.

$$E = V_{000} + \frac{E_k + E_{k+2\pi b}}{2} \pm \sqrt{|V_b|^2 + \frac{1}{4}(E_k - E_{k+2\pi b})^2} \quad (4.50)$$

ტალღური ვექტორი k დაეშალოთ b -ს პარალელურ და მართობ მდგენე-
ლად (ნახ. 35)

$$k = k' + k''$$

მასთან

$$kb = -k'b \quad (k'b = 0).$$

თუ ამ მნიშვნელობებს შევიტანთ (4.50) განტოლებაში მივიღებთ:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k''^2 + E_b + V_{000} + \frac{\hbar^2}{2m} \eta^2 \pm \sqrt{|V_b|^2 + 2E_b \cdot \frac{\hbar^2}{m} \cdot \eta^2}, \quad (4.50a)$$

8 ა. მირცხულავა

სადაც

$$\eta = k' - \pi b \quad (4.51)$$

და

$$E_b = \frac{\hbar^2}{2m} \pi^2 b^2.$$

პარამეტრი η გვიჩვენებს, თუ რამდენად ახლოსაა k ვექტორის მნიშვნელობა ბრევის არეკვლის პირობასთან. როდესაც $\eta = 0$, ბრევის არეკვლა ზუსტად სრულდება. როდესაც $\eta = \pi b - k' = \pi b \cdot \frac{V_b}{2E_b} \ll 1$, (4.50ა) გამოსახულება შეიძლება დავშალოთ მცირე პარამეტრის η -ს ხარისხებად, ეს კი გვაძლევს

$$E_1 \simeq E_b + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_{000} + |V_b| + \frac{\hbar^2}{2m} \eta^2 \left(\frac{2E_b}{|V_b|} + 1 \right)$$

და

$$E_2 \simeq E_b + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_{000} - |V_b| - \frac{\hbar^2}{2m} \eta^2 \left(\frac{2E_b}{|V_b|} + 1 \right). \quad (4.52)$$

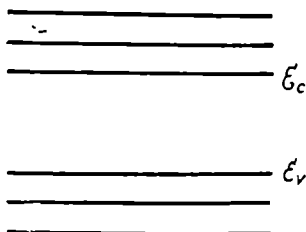
როდესაც $\eta = 0$, მაშინ

$$E_1 = E_{1min} = E_b + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_{000} + |V_b| = E_c$$

და

$$E_2 = E_{2max} = E_b + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V_{000} - |V_b| = E_v.$$

როდესაც $\eta \neq 0$, მაშინ E_1 -ს ყველა მნიშვნელობა მოთავსებულია E_c -ს ზევით, E_2 -ს ყველა მნიშვნელობა კი E_v -ს ქვემოთ, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 36-ზე. მაშასადამე, E_c და E_v -ს შორის ენერგიის მნიშვნელობები აღარ გვაქვს, მათ შორის მანძილი



ნახ. 36

$$E_c - E_v = 2|V_b| \quad (4.53)$$

არის აკრძალული ზონის სიგანე, პირობა

$$k^2 = (k + 2\pi b)^2$$

ანდა

$$(k + \pi b, b) = 0 \quad (4.54)$$

განსაზღვრავენ სიბრტყეებს, რომლებიც მართობია b ვექტორისა. ეს უკანასკნელი კი ცალსახად მოიცემა მიღერის p_1 , p_2 და p_3 ინდექსებით. ასეთ სიბრტყეებს უწოდებენ ბრილუენის სიბრტყეებს, ხოლო ამ სიბრ-

ტყეებით შემოსაზღვრულ არეებს — ბრილუენის ზონებს. მაშასადამე, ბრილუენის ზონების შიგნით ენერგია უწყვეტი ფუნქციაა k -სი, ხოლო ბრილუენის ზონის საზღვრებზე ენერგია განიცდის წყვეტას $2|V_b|$ სი-
დიდებზე.

§ 5. ბრილუენის ზონების აგება მვალდის მეთოდით

ნახ. 37-ში მოცემულია ატომური მესერის შებრუნებული მესერი, მესერის რომელიმე O კვანძიდან გავატაროთ — b ვექტორი და მოენახოთ იმ სიბრტყის (p) -ს განტოლება, რომელიც b ვექტორს უშუაღე ყრფს და ამავე დროს მისი მართო-
ბია. ამისათვის O წერტილიდან გა-
ვატაროთ $k/2\pi$ ვექტორი, რომლის
ბოლო წერტილი ემთხვევა (p) სი-
ბრტყეს, სხვანაირად რომ ვთქვათ,
 $k/2\pi$ არის (p) სიბრტყის მიმდინარე
კოორდინატები. თანახმად ნახ. 37-სა

$$\frac{b}{2} + \frac{k}{2\pi} = AB,$$

თუ ამ ტოლობის ორივე მხარეს
გავამრავლებთ სკალურად b -ზე და
მხედველობაში მივიღებთ, რომ $AB \cdot b = 0$, გვექნება

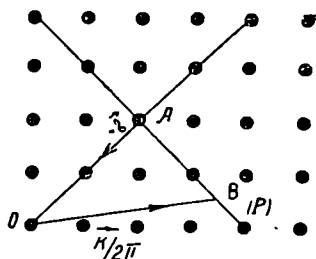
$$(k + \pi b, b) = 0, \quad (4.54)$$

ეს არის საძიებელი (p) სიბრტყეების — ბრილუენის საბრტყეების განტო-
ლება. თუ b ვექტორი განსაზღვრავს O წერტილიდან უახლოეს კვანძებს,
მაშინ სათანადო ბრილუენის ზედაპირების მიერ შემოსაზღვრული არე
იქნება ბრილუენის პირველი, ანდა ცენტრალური ზონა. თუ b ვექტორი
განსაზღვრავს O წერტილიდან მომდევნო უახლოეს კვანძებს, მაშინ სათა-
ნადო ბრილუენის ზედაპირების მიერ შემოსაზღვრულ არეს გამოკლებუ-
ლი ცენტრალური ზონის არე, იქნება ბრილუენის მეორე ზონა და ა. შ.

განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი:

1. ერთგანზომილებიანი მესერის შემთხვევა. ვთქვათ a
ატომური მესერის მუდმივაა, მაშინ შებრუნებული მესერის მუდმივა იქნე-
ბა $\frac{1}{a}$ (ნახ. 38). O წერტილიდან უახლოესი კვანძის კოორდინატებია.

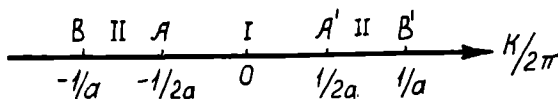
$$b = \pm \frac{1}{a}.$$



ნახ. 37

თუ ამ მონაკვეთების შუა წერტილებზე გავატარებთ მისდამი მართობ სიბრტყეებს, ისინი მოგვცემენ A და A' წერტილებს, რომელთა შორის მოთავსებული არე არის ბრილუენის პირველი, ანდა ცენტრალური ზონა. ამ ზონის შიგნით დაყვანილი ტალღური ვექტორი იცვლება შემდეგ ფარგლებში:

$$-\frac{1}{2a} < k/2\pi < \frac{1}{2a}.$$



ნახ. 38

შომდევნო უახლოესი კვანძების კოორდინატებია $b = \pm 2 \cdot \frac{1}{a}$. თუ ამ

მონაკვეთების შუა წერტილებზე გავატარებთ მისდამი მართობ სიბრტყეებს, ისინი მოგვცემენ B და B' წერტილებს. თუ ახლა BB' მონაკვეთს გამოვაკლებთ AA' მონაკვეთს, მივიღებთ ბრილუენის მეორე ზონას, ამ ზონის შიგნით დაყვანილი ვექტორი იცვლება შემდეგ ფარგლებში:

$$\frac{1}{2a} < k/2\pi < \frac{1}{a}$$

$$-\frac{1}{2a} < k/2\pi < -\frac{1}{a}.$$

ადვილი საჩვენებელია, რომ ბრილუენის მეორე ზონის „ფართი“ უდრის პირველი ზონის „ფართს“ და ა. შ.

2. ო რ გ ა ნ ზ ო მ ი ლ ე ბ ი ა ნ ი კ ვ ა დ რ ა ტ უ ლ ი მ ე ს ე რ ი ს შ ე მ თ ხ ვ ე ვ ა ვ თ ქ ვ ა თ, მოცემულია კვადრატული მესერი $a_1 = a_2 = a$. მაშინ შებრუნებული მესერი იქნება ისევე კვადრატული, რომლის მუდმივა არის $\frac{1}{a}$ (ნახ. 39).

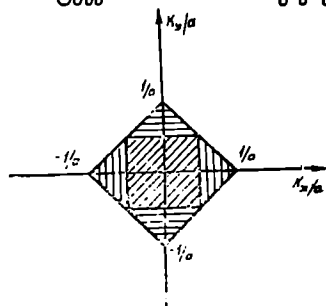
0 წერტილიდან ტოლ მანძილზე დაშორებულია ოთხი კვანძი, რომელთა კოორდინატებია $\left(0, \frac{1}{a}\right)$, $\left(0, -\frac{1}{a}\right)$, $\left(\frac{1}{a}, 0\right)$ და $\left(-\frac{1}{a}, 0\right)$.

თუ ამ მონაკვეთებს შუაზე გავყოფთ და შემდეგ გავატარებთ მისდამი მართობ სიბრტყეებს, მაშინ ამ სიბრტყეებს შორის მოთავსებული არე იქნება კვადრატი, რომელიც ნახ. 39-ზე დაშტრიხულია დახრილი ხაზებით. ეს არის ბრილუენის ცენტრალური ზონა, რომლის შიგნით ტალღური ვექტორი იცვლება შემდეგ ფარგლებში:

$$-\frac{1}{2a} < k_x/2\pi < \frac{1}{2a},$$

$$-\frac{1}{2a} < k_y/2\pi < \frac{1}{2a}.$$

პირველი ზონის ფართობი უდრის $\frac{1}{a^2}$ -ს. მომდევნო უახლოესი $\mathbf{k}$ ვექტორის კოორდინატებია: $\left(\frac{1}{a}, \frac{1}{a}\right)$, $\left(-\frac{1}{a}, \frac{1}{a}\right)$, $\left(-\frac{1}{a}, -\frac{1}{a}\right)$ და $\left(\frac{1}{a}, -\frac{1}{a}\right)$. თუ ამ მონაკვეთების შუა წერტილებზე გავატარებთ მისდამი მართობ სიბრტყეებს, მაშინ ამ სიბრტყეებს შორის მოთავსებული იქნება ისევე კვადრატები (ნახ. 39-ზე გარეთა კვადრატები). თუ ამ კვადრატის ფართს გამოვკლებთ შიდა კვადრატის ფართს, მივიღებთ ბრილუენის მეორე ზონას, რომელიც ნახ. 39-ზე დაშტრიხულია პორიზონტალური და ვერტიკალური ხაზებით. მეორე ზონაში (იგი შედგება ოთხი უბნისაგან) ელექტრონის დაყვანილი ტალღური ვექტორი იცვლება შემდეგ ფარგლებში



ნახ. 39

$$\begin{aligned} \frac{1}{2a} < k_x/2\pi < \frac{1}{a} & \quad -\frac{1}{2a} < k_x/2\pi < \frac{1}{2a} \\ -\frac{1}{a} < k_x/2\pi < -\frac{1}{2a} & \quad -\frac{1}{2a} < k_x/2\pi < -\frac{1}{a} \\ -\frac{1}{2a} < k_y/2\pi < \frac{1}{a} & \quad \frac{1}{2a} < k_y/2\pi < \frac{1}{a} \\ -\frac{1}{a} < k_y/2\pi < -\frac{1}{2a} & \quad -\frac{1}{2a} < k_y/2\pi < -\frac{1}{a} \end{aligned}$$

ადგილი საჩვენებელია, რომ მეორე ზონის ფართი უდრის აგრეთვე $\frac{1}{a^2}$ -ს,

ამიტომ $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{2\pi}{a}$ „გარდაქმნის საშუალებით მეორე ზონა დაიყვანება პირველ ზონაზე.

ანალოგიურად მიიღებინა ბრილუენის დანარჩენი ზონები.

3. სამგანზომილებიანი მესერის შემთხვევა. ზოგად შემთხვევაში ბრილუენის ზონების გრაფიკული წარმოდგენა მეტად რთულია. თუ მესერი კუბურია პარამეტრებით $a_1 = a_2 = a_3 = a$, მაშინ ბრილუენის პირველი ზონა იქნება კუბი, რომლის მოცულობა არის $\frac{1}{a^3}$. მეორე ზონა არის 14-წახნაგა ფიგურა და ა. შ.

ბრილუენის ზემოთ მოყვანილი ზონები მიღებულია ევალდის გრაფიკული მეთოდით. შეიძლება ისინი აგრეთვე მიღებული იქნეს მათემატიკური გზით. მართლაც, ბრილუენის სიბრტყეთა განტოლება (4.54) შეიძლება აგრეთვე ჩაიწეროს შემდეგი სახით:

$$kb = -\pi b^2, \text{ სადა } b = p_1 b_1 + p_2 b_2 + p_3 b_3, \quad (4.54a)$$

ორთოგონალური მესერის შემთხვევაში $b_i = \frac{1}{a_i}$, ამიტომ (4.54a) საბოლოოდ ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$k_1 p_1 + k_2 p_2 + k_3 p_3 = -\frac{\pi}{a} (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) \quad (4.55)$$

$$(a_1 = a_2 = a_3 = a).$$

k_i არის სიბრტყის მიმდინარე კოორდინატები, ხოლო p_i — აღებული სიბრტყეების მიღერის ინდექსები. ერთი განზომილების შემთხვევაში $k_2 = k_3 = 0$ და $p_2 = p_3 = 0$, ამიტომ, თანახმად (4.55) განტოლებისა, გვექნება

$$k_1 = -\frac{\pi}{a} p_1.$$

$p_1 = \pm 1$, გვაძლევს პირველ ზონას, სადაც დაყვანილი ტალღური ვექტორი იცვლება შემდეგ ფარგლებში

$$-\frac{1}{2a} < k_1/2\pi < \frac{1}{2a}.$$

$p_1 = \pm 2$, გვაძლევს მეორე ზონას (თუ გამოვაკლებთ პირველი ზონის არეს), სადაც დაყვანილი ტალღური ვექტორი იცვლება შემდეგ ფარგლებში:

$$-\frac{1}{2a} < k_1/2\pi < \frac{1}{a} \text{ და } -\frac{1}{2a} < k_1/2\pi < -\frac{1}{a} \text{ და ა. შ.}$$

ამრიგად, მივიღეთ იგივე შედეგები, რაც ევალდის გრაფიკული მეთოდით. ორგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაში $k_3 = 0$ და $p_3 = 0$, მაშინ, თანახმად (4.55) ფორმულისა, გვექნება:

$$k_1 p_1 + k_2 p_2 = -\frac{\pi}{a} (p_1^2 + p_2^2).$$

$p_1 = \pm 1$ და $p_2 = 0$ გვაძლევს ორ სწორ ხაზს, რომლებიც პარალელურია $k_2/2\pi$ ღერძისა და მისგან დაშორებულია $\pm \frac{1}{2a}$ მანძილით. ასევე, $p_1 = 0$ და $p_2 = \pm 1$ გვაძლევს ორ სწორ ხაზს, რომლებიც პარალელურია $k_1/2\pi$ ღერძისა და მისგან დაშორებულია $\pm \frac{1}{2a}$ მანძილით. ამ სწორი ხაზებით შემოსაზღვრული ფართი არის კვადრატი, რომელიც წარმოადგენს ბრილუენის პირველ ზონას. $p_1 = \pm 1$ და $p_2 = \pm 1$ გვაძლევს ოთხი სწორი ხაზის განტოლებას

$$\pm k_1 \pm k_2 = -2 \cdot \frac{\pi}{a}.$$

ამ ხაზებით შემოსაზღვრული არე არის ისევე კვადრატი (ნახ. 39-ზე გარეთა კვადრატი), რომლის ფართს გამოკლებული შიდა კვადრატის ფართი, გვაძლევს ბრილუენის მეორე ზონას და ა. შ. ანალოგიურად—სამგანზომილებიანი მესერის შემთხვევაშიც.

§ 6. კვანტურ მდგომარეობათა ჩიტხვი ზონაში

მოცემული ზონის შიგნით ელექტრონის ენერგია ცალსახად განისაზღვრება ტალღური ვექტორის მოცემით. ამიტომ ზონაში ელექტრონის ენერგიის ყველა მნიშვნელობის მისაღებად საჭიროა განვსაზღვროთ ტალღური ვექტორის ყველა მნიშვნელობა ზონაში. ეს უკანასკნელი შეიძლება მონახული იქნეს ხელოვნური გზით. ამისათვის განვიხილოთ პარალელუპიპედი, რომლის წახნაგებია Ga_1 , Ga_2 და Ga_3 , სადაც $G \gg 1$. ამ პარალელუპიპედს ვუწოდოთ კრისტალის ძირითადი არე და მოვითხოვოთ, რომ ელექტრონის ტალღურ ფუნქციას ახასიათებდეს შემდეგი პერიოდულობა

$$\psi(r + Ga_1) = \psi(r), \quad (4.56)$$

სადაც

$$\psi(r) = e^{ikr} \cdot u(r).$$

ვინაიდან $u(r+a) = u(r)$, სადაც a — მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორია, ამიტომ

$$u(r + Ga_1) = u(r) \quad (G — მთელი რიცხვია)$$

თანახმად (4.56) პირობისა, ასეთივე პერიოდულობა უნდა ახასიათებდეს აგრეთვე e^{ikr} მამრავლსაც, ე. ი.

$$e^{ik(r+Ga_1)} = e^{ikr}, \text{ აქედან } e^{ika_1} = 1.$$

უკანასკნელი განტოლება დაკმაყოფილებული იქნება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, თუ Gka_l ჯერადი რიცხვია 2π -ს. იგი საშუალებას გვაძლევს მოვინახოთ k -ს ყველა შესაძლო მნიშვნელობა ზონის შიგნით. მართლაც, დაყვანილი ვექტორი k შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$k = \frac{2\pi}{G} \sum x_n b_n,$$

სადაც b_n შებრუნებული მესერის ძირითადი პერიოდებია, ხოლო x_n — მთელი რიცხვები.

$$ka_l = \frac{2\pi}{G} \sum_n x_n a_l b_n = \frac{2\pi}{G} \sum x_n \delta_{ln} = \frac{2\pi}{G} x_l,$$

მეორე მხრივ

$$-\pi < ka_l < \pi,$$

ამიტომ

$$-\pi < \frac{2\pi}{G} x_l < \pi,$$

ანდა

$$-\frac{G}{2} < x_l < \frac{G}{2}.$$

ამრიგად x_1 , x_2 და x_3 სიდიდეებს შეუძლიათ ზონაში G მნიშვნელობების მიღება. მაგრამ ვინაიდან x_1 , x_2 და x_3 ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელია, ამიტომ მათი მნიშვნელობათა საერთო რიცხვი იქნება G^3 . მეორე მხრივ, x_1 , x_2 და x_3 -ს ერთ გარკვეულ მნიშვნელობას ეთანადება k -ს, ე. ი. ენერგიის ერთი გარკვეული მნიშვნელობა, მაშასადამე ზონაში გვექნება G^3 კვანტური მდგომარეობა. თუ გავითვალისწინებთ ელექტრონის სპინის ორ შესაძლო მნიშვნელობას, მაშინ ზონაში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი იქნება $2G^3$. კრისტალის ძირითადი არის მოცულობაა $a_1 a_2 a_3 G^3$, მაგრამ $a_1 a_2 a_3$ არის ელემენტარული უჯრედის მოცულობა; ამიტომ $G^3 = N$ იქნება ელემენტარული უჯრედების რიცხვი, ხოლო $2N$ — კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი.

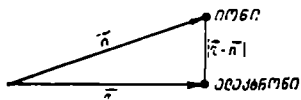
იზოლირებულ ატომში ელექტრონის მდგომარეობა განისაზღვრება l აზიმუტალური კვანტური რიცხვით. მეორე მხრივ, ატომში ყოველ დისკრეტულ დონეს კრისტალში შეესაბამება სათანადო ზონა. შეიძლება ვუჩვენოთ, რომ ზოგად შემთხვევაში ზონაში გვაქვს $2(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობანი. კერძოდ, თუ $l=0$ (S მდგომარეობა) კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი უდრის $2N$. თუ $l=1$ (p მდგომარეობა) კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი უდრის $6N$ -ს და ა. შ.

სანამ ბლოხის მეთოდს განვიხილავდეთ, ავხსნათ ზონების წარმოშობის ფიზიკური არსი. ვთქვათ, მოცემულია ორი დადებითი იონი და ერთი ელექტრონი. ჯერ ვიგულისხმოთ, რომ ეს იონები ისეთ მანძილებზე არიან დაშორებული, რომ ერთმანეთისაგან, რომ შეიძლებოდეს მათ შორის ურთიერთქმედების უგულვებელყოფა. ამ დროს ელექტრონი ლოკალიზებული იქნება მხოლოდ პირველ ან მეორე იონთან. ორივე ამ კონფიგურაციას ეთანადება ენერგიის ერთი და იგივე მნიშვნელობები. ამ შემთხვევაში ამბობენ, რომ მდგომარეობა ორჯერადად გადაგვარებულია. ახლა დავიწყეთ იონების ერთმანეთთან დაახლოება. ამ დროს წარმოიშობა ელექტრონის ურთიერთქმედება ორივე იონთან, რის შედეგად გარკვეული ალბათობით ელექტრონი აღმოჩნდება როგორც პირველ ისე მეორე იონთან. გარკვეულ მანძილებზე იონების დაახლოებისას, ეს ელექტრონი გახდება საერთო—კოლექტივიზირებული ორივე იონის მიმართ. ამ დროს გადაგვარება მოიხსნება და ენერგიის ერთი დონის ნაცვლად მიიღება ორი დონე.

ანალოგიური მდგომარეობა გვაქვს, როდესაც მოცემულია N ერთნაირი იონი და ერთი ელექტრონი. თუ ეს იონები დიდი მანძილით არიან დაშორებული ერთმანეთისაგან, მაშინ ელექტრონი შეიძლება ლოკალიზებული იყოს ერთ-ერთ იონთან. ასეთ კონფიგურაციათა რიცხვი უდრის N -ს. მდგომარეობა N -ჯერადად გადაგვარებულია, რადგან ყველა ამ კონფიგურაციას ერთი და იგივე სიდიდის ენერგია ეთანადება. ახლა დავიწყეთ იონების ერთმანეთთან დაახლოება, შედეგად გვექნება ელექტრონის ურთიერთქმედება აღნიშნულ იონებთან და, როდესაც იონებს შორის მანძილი მყარ სხეულში წონასწორული მანძილის ტოლი გახდება, ეს ელექტრონი აღმოჩნდება კოლექტივიზირებული ყველა იონის მიმართ. ამ დროს გადაგვარება მოიხსნება და ენერგიის ერთი დონის ნაცვლად გვექნება ძალზე ახლო მდებარე N დონე (ზონა). როგორც ვიცით, შიდა ჩაკეტილი შრის ელექტრონების ტალღური ფუნქციები თითქმის აღარ გადაფარავენ ერთმანეთს, ამიტომ იონების ერთმანეთთან დაახლოებისას მათი ენერგეტიკული დონეები აღარ იხლიჩებიან, ისინი რჩებიან ისევე დისკრეტული, როგორც იზოლირებულ ატომებში. ატომის სავალენტო ელექტრონების (გარეთა არაჩაკეტილი შრის ელექტრონები) ტალღური ფუნქციები იონების დაახლოებისას ძლიერად გადაფარავენ ერთმანეთს, ამიტომ ეს ელექტრონები გვაძლევენ სათანადო ზონებს. ატომის ყოველ მდგომარეობას ($s, p, d, \dots$) მყარ სხეულებში ეთანადება სათანადო ზონები.

გადავიდეთ ახლა ბლოხის მეთოდის განხილვაზე. სიმარტივისათვის განვიხილოთ ატომის s მდგომარეობა. ამ დროს ატომში ელექტრონული მუხტების სფერული სიმეტრიით განაწილების გამო, როგორც ტალღური

ფუნქცია, ისე მესერის ველი მხოლოდ r -ის ფუნქციაა. აღვნიშნოთ მესერის რომელიმე იონის რადიუსვექტორი n -ით, ხოლო ამ იონთან დაკავშირებული ელექტრონისა — r -ით (ნახ. 40). მაშინ ელექტრონის როგორც ტალღური ფუნქცია, ისე მესერის ველი დამოკიდებული იქნება $r - n$ -ის აბსოლუტურ სიდიდეზე. ბლოხის მეთოდში ნულოვან მიახლოებაში მიღებულია, რომ ელექტრონი ლოკალიზებულია მხოლოდ აღებულ იონთან და მისი ურთიერთქმედება დანარჩენ იონებთან უგულვებელყოფილია. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ნულოვან მიახლოებაში განიხილება იზოლირებული ატომის პრობლემა, რომელიც აიწერება შრედინგერის შემდეგი განტოლებით:



ნახ. 40

$$\Delta \varphi (|r - n|) + \frac{2m}{\hbar^2} (\epsilon_0 - u(|r - n|)) \varphi (|r - n|) = 0, \quad (4.57)$$

სადაც $u(|r - n|)$ არის ელექტრონის პორტენციალური ენერგია აღებული იონის ველში, $\varphi (|r - n|)$ — ატომური ტალღური ფუნქცია და ϵ_0 ენერგიის საკუთარი მნიშვნელობები. რომელიც, როგორც ვიცით, დისკრეტულია. დავუშვათ, ატომის პრობლემა ამოხსნილია. ე. ი. ვიპოვეთ $\varphi (|r - n|)$ და ϵ_0 სიდიდეები. ამის შემდეგ ენერგიის შემდგომი მიახლოების საპოვნელად საჭიროა, შრედინგერის შემფოთების თეორიის თანახმად, მოვანახოთ ნულოვანი მიახლოების ტალღური ფუნქცია, რომელიც აკმაყოფილებს ბლოხის პირობას:

$$\psi_k(r+a) = e^{ika} \psi_k(r).$$

ნახ. 40-დან ჩანს, რომ $r \rightarrow r+a$ ჩანაცვლებისას, იონის ფიქსირებული მდგომარეობის დროს, არ მიიღება ელექტრონის იგივეური მდგომარეობა, რის გამოც $\varphi (|r - n|)$ ფუნქციას ვერ ავიღებთ ნულოვანი მიახლოების ფუნქციად, რადგანაც იგი ბლოხის პირობას არ აკმაყოფილებს. მაგრამ ადვილად შეიძლება ვუჩვენოთ, რომ ატომური ფუნქციების ისეთი წრფივი კომბინაცია შეიძლება შევადგინოთ, რომელიც ბლოხის პირობას დააკმაყოფილებს, ასეთია:

$$\psi_k(r) = \sum e^{ikn} \varphi (|r - n|). \quad (4.58)$$

მართლაც, ავიღოთ მესერის მთელკომპონენტიანი ვექტორი $m = \sum m_i a_i$, მაშინ $r \rightarrow r+m$ ჩანაცვლება გვაძლევს

$$\begin{aligned} \psi_k(|r+m|) &= c \sum e^{ikn} \varphi (|r+m-n|) = \\ &= c e^{ikm} \sum_{n-m} e^{ik(n-m)} \varphi (|r-n+m|), \end{aligned}$$

სადაც აჯამება ხდება $n-m$ სხვაობის მიხედვით. თუ აღვნიშნავთ $n-m \rightarrow n'$ -ით, მაშინ

$$\psi(|r+m|) = e^{ikm} \cdot c \sum e^{ikn'} \varphi(|r-n'|) = e^{ikm} \psi_k(r).$$

მაშასადამე (4.58) ფუნქცია აკმაყოფილებს ბლოხის პირობას. სწორედ ამის გამო ამ მეთოდს ეწოდება $LCAO$ მეთოდი (ატომური ორბიტების წრფივი კომბინაცია). ნულოვანი მიახლოების ფუნქციის არჩევის შემდეგ ენერგიის გამთვლა წარმოებს ჩვეულებრივი მეთოდით:

$$\varepsilon = \frac{\int \psi_k^* H \psi_k d\tau}{\int \psi_k^* \psi_k d\tau}, \quad (4.59)$$

სადაც

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r).$$

თუ (4.59)-ში შევითავსებთ ψ_k და H -ის მნიშვნელობებს და შემდეგ გამოვიყენებთ შრედინგერის განტოლებას (4.57)-ს მივიღებთ:

$$E = E_0 + \frac{\sum_{n,m} e^{ik(n-m)} \int \varphi^*(|r-m|) [V(r) - u(|r-n|)] \varphi(|r-n|) dr}{\sum_{n,m} e^{ik(n-m)} \int \varphi^*(|r-m|) \varphi(|r-n|) dr}.$$

აქ ნამდვილი პოტენციალი $V(r)$ და მიახლოებითი $u(|r-n|)$ აღებულია სხვადასხვა წერტილებში. ამიტომ, თუ მათ დავიცვანთ ერთი და იგივე წერტილზე, მაშინ სხვაობა $V(r) - u(r)$ იქნება შეშფოთების პოტენციალი. ამისათვის მოვახდინოთ ჩასმა $r \rightarrow r+m$, მაშინ მივიღებთ:

$$E = E_0 + \frac{\sum_{n,m} e^{ik(n-m)} \int \varphi^*(r+(n-m)) [V(r) - u(r)] \varphi(r) dr}{\sum_{n,m} e^{ik(n-m)} \int \varphi^*(r+(n-m)) \varphi(r) dr}.$$

ვინაიდან მარჯვენა მხარეში აჯამება $n-m$ სიდიდით, ამიტომ ორმაგი ჯამი შეიძლება შევცვალოთ ერთმაგი ჯამით $n-m \rightarrow n'$ ჩანაცვლების საშუალებით

$$\sum_{n,m} e^{ik(n-m)} = \sum_{n'} e^{ikn'} = \sum_n e^{ikn},$$

საბოლოოდ მიიღება —

$$E = E_0 + \frac{\sum_n e^{ikn} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n})(V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r}))\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r}}{\sum_n e^{ikn} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n})\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r}}. \quad (4.60)$$

განვიხილოთ ცალ-ცალკე მრიცხველსა და მნიშვნელში მოცემული ჯამის მნიშვნელობები. ჯერ განვიხილოთ მნიშვნელში მოცემული ჯამი

$$\begin{aligned} \sum_n e^{ikn} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n})\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} &= \int \varphi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \\ &+ \sum_{n_1} e^{ikn_1} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n}_1)\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \dots \end{aligned}$$

პირველი წევრი ეთანადება $\mathbf{n} = 0$. ეს არის კოორდინატთა სათავედ აღებული კვანძის რადიუსვექტორი.

$\mathbf{n}_1$ არის სათავედან უახლოეს მანძილებზე მოთავსებული კვანძ-წერტილების რადიუსვექტორი და ა. შ.

თუ ატომური ფუნქციები $\varphi(\mathbf{r})$ ნორმირებულია ერთზე, მაშინ

$$\int \varphi^*(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 1.$$

$\varphi(\mathbf{r})$ და $\varphi(\mathbf{r} + \mathbf{n}_1)$ არიან საწყისი და მეზობელი უახლოესი კვანძის შესაბამისი ატომის ტალღური ფუნქციები. ამ ინტეგრალის მნიშვნელობა დამოკიდებულია ამ ფუნქციების გადაფარვის სიდიდეზე. ძლიერი ბმის შემთხვევაში ელექტრონი ძირითადად ლოკალიზებულია ერთ-ერთ იონთან, ამიტომ მეზობელი ატომის ტალღური ფუნქციები თითქმის აღარ იძლევიან გადაფარვას, ამიტომ

$$\int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n}_1)\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \ll 1.$$

ცხადია, რომ შემდგომი წევრები, რომლებიც გამოხატავენ უფრო შორეული ატომების ტალღური ფუნქციების გადაფარვას, კიდევ უფრო მცირე იქნება, ვიდრე ზემოთ განხილული, ამიტომ საკმარისი მიახლოებით შეგვიძლია მივიღოთ

$$\sum_n e^{ikn} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n})\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \simeq 1,$$

ხოლო რაც შეეხება მრიცხველს

$$\begin{aligned} \sum e^{ikn} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n})(V - u)\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} &= \\ &= \int \varphi^*(\mathbf{r})(V - u)\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \sum_{n_1} e^{ikn_1} \int \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{n}_1)(V - u)\varphi(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \dots \end{aligned}$$

აქ პირველი და მეორე შესაყრები უნდა იქნეს აღებული, რადგანაც, თუ პირველ ინტეგრალში $\varphi^*(r)\varphi(r)$ დიდია, სამაგიეროდ $V(r) - u(r)$ მცირეა (ზუსტი $V(r)$ და არაზუსტი $u(r)$ პოტენციალის მნიშვნელობები მოცემული იონის მახლობელ წერტილში თითქმის ერთმანეთის ტოლია), მეორე ინტეგრალში კი $\varphi^*(r+n_1)\varphi(r)$ მცირეა, სამაგიეროდ $V(r) - u(r)$ დიდია (რადგანაც $V(r)$ პერიოდული ფუნქციაა, $u(r)$ კი, მოცემული იონიდან რაც უფრო შორსმდებარე წერტილს ავიღებთ, მით უფრო მცირდება). ჯამის დანარჩენი წევრები შეიძლება უგულვებელყოფილი იქნეს შორეული ატომების ტალღური ფუნქციების მცირედ გადაფარვის გამო. საბოლოოდ გვექნება

$$E = E_0 - C - A_n \sum_{n_1} e^{ikn_1}, \quad (4.61)$$

სადაც

$$C = - \int |\varphi(r)|^2 (V - u) dr, \\ A_n = - \int \varphi^*(r+n_1) (V(r) - u(r)) \varphi(r) dr \quad (4.62)$$

აქამა ხდება უახლოესი მეზობელი ატომების მიმართ, სიდიდე C არ შეიცავს ტალღურ ვექტორს, ამიტომ იგი ზონასთან დაკავშირებული არ არის, რადგანაც ზონაში ელექტრონის ენერგია k -ს ფუნქციაა. ზონასთან დაკავშირებულია მესამე წევრი. აქ k არის დაყვანილი ტალღური ვექტორი, რომელიც ზონაში ღებულობს N მნიშვნელობებს, სადაც N არის ელემენტარული უჯრედების რიცხვი, ბრავეს მესერის შემთხვევაში — ატომების რიცხვი. ამრიგად, (4.61) ფორმულა გვაძლევს ზონას, რომელიც შეიცავს ენერგიის N მნიშვნელობებს. ვინაიდან ატომების რიცხვი ძალზე დიდია ($N \sim 10^{23}$), ხოლო ზონის სიგანე — რამდენიმე ელექტრონვოლტი. ზონაში მეზობელი ენერგიის დონეებს შორის მანძილი იმდენად მცირეა, რომ პრაქტიკულად იგი შეიძლება ჩაითვალოს როგორც უწყვეტი. მიუხედავად ამისა, არსებითია მაინც ის გარემოება, რომ ზონაში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი სასრულოა.

A_n კოეფიციენტი დაკავშირებულია მეზობელი ატომების ტალღური ფუნქციების გადაფარვის სიდიდესთან. რაც უფრო მეტია მეზობელი ატომების ტალღური ფუნქციების გადაფარვა, მით მეტია A_n კოეფიციენტის მნიშვნელობა და მაშასადამე, მით მეტია ზონის სიგანე. შინაგანი შეესებულობის შრის ელექტრონების ტალღების ფუნქციები თითქმის აღარ ფარავენ ერთმანეთს, ამიტომ სათანადო ელექტრონების ზონა იმდენად ვიწროა, რომ ისინი თითქმის არაფრით განსხვავდებიან დისკრეტული ზაზებისაგან. სავალენტო ელექტრონების ტალღური ფუნქციები, აღებული მეზობელი ატომებისათვის, საკმარისად ფარავენ ერთმანეთს და რაც მეტია გადაფარვა, მით უფრო ფართო იქნება სათანადო ზონა. ამრიგად მივიღეთ

ზემოთ დადგენილი შედეგი. (65) ფორმულის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი.

1. კუბური მესერის შემთხვევა. აქ უახლოესი მეზობლების რიცხვი უდრის 6-ს, რომელიც ტოლი მანძილებით არის დაშორებული ცენტრალური ატომიდან, ამიტომ $A_n = A$. უახლოესი კვანძების n_1 -ს კოორდინატებია შემდეგი: $a(100)$, $a(010)$, $a(\bar{1}00)$, $a(0\bar{1}0)$, (001) და $(00\bar{1})$. გამოვთვალოთ ჯამი $\sum_{n_1} e^{ikn_1}$. ამ უკანასკნელში n_1 არის ზემოთ

მოცემული 6 კვანძის სათანადო კოორდინატები, რომელთა ჩასმა გვაძლევს

$$\begin{aligned} \sum_{n_1} e^{ikn_1} &= e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a} = \\ &= 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \end{aligned}$$

ამრიგად, Γ_c მესერის შემთხვევაში ვღებულობთ:

$$E(k) = E_0 - c - 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (4.63)$$

2. განვიხილოთ Γ_c^* მესერი, თუ ელემენტარული უჯრედის ცენტრში მოთავსებულ კვანძს ავიღებთ საწყის წერტილად, მაშინ გვექნება ტოლ მანძილებზე (წვერობზე) მდებარე 8 კვანძი, რომელთა კოორდინატებია შემდეგი:

$$\begin{aligned} &a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad a\left(\frac{\bar{1}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \\ &a\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\bar{1}}{2}\right), \quad a\left(\frac{\bar{1}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, \frac{1}{2}\right), \\ &a\left(\frac{\bar{1}}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\bar{1}}{2}\right), \quad a\left(\frac{1}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}\right), \\ &a\left(\frac{1}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad a\left(\frac{\bar{1}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}, \frac{\bar{1}}{2}\right). \end{aligned}$$

მაშინ

$$\begin{aligned} \sum e^{ikn_1} &= (e^{ik_x a/2} + e^{-ik_x a/2})(e^{ik_y a/2} + e^{-ik_y a/2})(e^{ik_z a/2} + e^{-ik_z a/2}) = \\ &= 8 \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}. \end{aligned}$$

ამრიგად, Γ_c^* მესერისათვის ვღებულობთ

$$E(k) = E_0 - e - 8A \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2}. \quad (4.64)$$

სრულიად ანალოგიურად, Γ_c^I მესერისათვის მიიღება შემდეგი ფორმულა

$$E(k) = E_0 - c - 4A \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \right. \\ \left. + \cos \frac{k_z a}{2} \cos \frac{k_x a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right). \quad (4.65)$$

(4.63), (4.64) და (4.65) ფორმულები გვაძლევენ ზონაში ენერგიის დამოკიდებულებას დაყვანილი k ვექტორისაგან. განვიხილოთ ამ დამოკიდებულების სახე ზონის ზედა და ქვედა ნაპირის მახლობლობაში.

განვიხილოთ Γ_c მესერის შემთხვევა:

ზონის ქვედა ნაპირზე მივიღოთ $k=0$, მაშინ ამ ნაპირის მახლობლად k მცირე სიდიდეა, ამიტომ

$$\cos k_x a \simeq 1 - \frac{1}{2} (k_x a)^2,$$

$$\cos k_y a \simeq 1 - \frac{1}{2} (k_y a)^2,$$

$$\cos k_z a \simeq 1 - \frac{1}{2} (k_z a)^2.$$

ამრიგად

$$E(k) \simeq E_0 - c - 6A + Aa^2 \cdot k^2,$$

როცა

$$k=0 \quad E(0) = E_c = E_0 - c - 6A,$$

ამიტომ

$$E(k) = E_c + Aa^2 k^2.$$

ე. ი. ზონის ქვედა კიდის მახლობლად, ისე როგორც თავისუფალი ელექტრონისათვის, ენერგია k -ს კვადრატული ფუნქციაა, ამიტომ ეფექტური მასის შემოტანით

$$m^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \hbar^2 / 2aA > 0,$$

ვღებულობთ

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2.$$

სრულიად ანალოგიური შედეგი მიიღება Γ_c^I და Γ_c^I მესერის შემთხვევაში. თანახმად (4.62) დამოკიდებულებისა, რაც უფრო ნაკლებად გადაფარავნ მეზობელი ატომების ტალღური ფუნქციები (ე. ი. მცირეა A_n), მით უფრო მეტია ელექტრონის ეფექტური მასა და პირიქით, რაც სავსებით ნათელია.

განვიხილოთ $E(k)$ -ს სახე ზონის ზედა კიდის მახლობლად Γ_c მესერის შემთხვევაში, თუ ზონის ზედა კიდის შესაბამის ტალღურ ვექტორს აღვ-

ნიშნავთ $k_0(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ -ით, მაშინ დაშლა უნდა ვაწარმოოთ k_0 წერტილის მახლობლად

$$\begin{aligned}\cos k_x a &= -\cos(\pi - k_x a) \simeq -\left(1 - \frac{1}{2} a^2 (\pi/a - k_x)^2\right) = \\ &= -1 + \frac{1}{2} a^2 (\pi/a - k_x)^2\end{aligned}$$

$$\cos k_y a = -\cos(\pi - k_y a) \simeq -1 + \frac{1}{2} a^2 (\pi/a - k_y)^2$$

$$\cos k_z a = -\cos(\pi - k_z a) \simeq -1 + \frac{1}{2} a^2 (\pi/a - k_z)^2.$$

ამრიგად

$$E = E_0 - C - 2A \left(-3 + \frac{1}{2} a^2 (k_0 - k)^2 \right) =$$

$$= E_0 - C + 6A - Aa^2 (k_0 - k)^2,$$

როდესაც

$$k = k_0, \quad E(k_0) = E_v = E_0 - C + 6A,$$

ე. ი.

$$E(k) = E_v - Aa^2 (k_0 - k)^2.$$

ენერგია ისევ კვადრატული ფუნქციაა k -სი, ამიტომ აზრი აქვს ეფექტური მასის შემოტანას

$$m^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2a^2 A} < 0.$$

ენერგიისათვის ვლუბულობთ

$$E(k) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_0 - k)^2. \quad (4.66)$$

ამრიგად, ზონის ზედა კიდე ეთანადება უარყოფითი ეფექტური მასა. სრულიად ანალოგიური შედეგი მიიღება I_v^x და I_v^y მესერისათვის. ეფექტური მასა შემოვიტანეთ მხოლოდ ანალოგიის გასატარებლად კლასიკური ნაწილაკის მოძრაობასთან, ამიტომ ეფექტურ მასას შეიძლება ჰქონდეს როგორც დადებითი, ისე უარყოფითი მნიშვნელობა (ამ საკითხს ჩვენ ისევ დავუბრუნდებით ქვემოთ). ზონის სიგანე უდრის

$$\Delta = E_c - E_v = 12A \quad (4.67)$$

მაშასადამე, ზონის სიგანე მით მეტია, რაც მეტია გადაფარვის ინტეგრალის მნიშვნელობა A , ე. ი. რაც უფრო მეტად უახლოვდება ელექტრონი თავისუფალი ელექტრონის მდგომარეობას.

ბლოხის ზემოთ განხილულ თეორიაში აღებული იყო ატომის s მდგომარეობა, მიახლოებით ტალღურ ფუნქციად — ატომური ფუნქციების წრფივი კომბინაცია:

$$\psi_k = \sum e^{ikn} \varphi(|r - n|).$$

თუ s მდგომარეობის ნაცვლად ავიღებთ p მდგომარეობას, მაშინ მიახლოებით ტალღურ ფუნქციად უნდა იყოს აღებული ატომური ფუნქციების შემდეგი კომბინაცია:

$$\psi_k = \sum e^{ikn} [\alpha \varphi_x(|r - n|) + \beta \varphi_y(|r - n|) + \gamma \varphi_z(|r - n|)]. \quad (4.68)$$

ამის შემდეგ გამოთვლები წარმოებს სრულიად ანალოგიურად ზემოთ მოყვანილისა. გამოთვლების შედეგი ასეთია: ატომურ p მდგომარეობაში გვაქვს სამი ზონა, რომლებიც ეთანადებიან მაგნიტური კვანტური რიცხვის მნიშვნელობებს $m = 1, 0, -1$. თითოეულ ზონაში გვაქვს $2N$ კვანტური მდგომარეობა, მაგრამ ზონები ერთმანეთს გადაფარავენ, ამიტომ უკეთესია განვიხილოთ ერთი ზონა, სადაც $6N$ კვანტური მდგომარეობებია.

ზოგად შემთხვევაში გვექნება: თუ ატომური მდგომარეობა ხასიათდება l აზიმუტური კვანტური რიცხვით, მაშინ მესერში მას ეთანადება ზონა, რომელშიაც გვაქვს $2(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობები.

მაგალითად ავიღოთ რკინის ჯგუფი (მათ მიეკუთვნება ატომები, რომელთა ნაწილობრივ შევსებულ შრეს შეადგენს $3d$ — შრე, ესენია Se-დან დაწყებული Cu-მდე). ამ ატომების სავალენტო ელექტრონებია $4s$ და $4p$. მათში ნაწილობრივ შევსებული $3d$ შრე უფრო ღრმად იმყოფება, ამიტომ $3d$ ელექტრონების ტალღური ფუნქციების გადაფარვა უფრო სუსტია, ვიდრე გადაფარვა $4s$ და ასევე $4p$ ელექტრონების ტალღური ფუნქციებისა. ამის გამო $4s$ და $4p$ ზონა უფრო განიერია, ვიდრე $3d$ ზონა. ცდების თანახმად, $4s$ ზონის სიგანე უდრის $10eV$, ხოლო $3d$ ზონისა — $5eV$. სამაგიეროდ, $3d$ ზონაში ელექტრონების რიცხვი 5-ჯერ მეტია, ვიდრე $4s$ ზონაში. $4s$ ელექტრონები უფრო კოლექტივიზირებულია, ვიდრე $3d$ ელექტრონები. ამიტომ გამტარებლობა გამოწვეულია $4s$ ელექტრონებით. $3d$ ელექტრონებთან არის დაკავშირებული კრისტალის მაგნიტური თვისებები. ცდების თანახმად ეს ზონები ფარავენ ერთმანეთს.

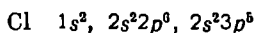
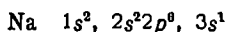
ზოგადი დასკვნა ასეთია: თუ ელემენტარული უჯრედი შეიცავს რამდენიმე არაერთგვაროვან ატომს, მაშინ თითოეულ ატომურ მდგომარეობას ეთანადება ზონა, რომელშიაც $2(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობებია. აუცილებელია მხედველობაში იქნეს მიღებული ის გარემოება, რომ ერთგვაროვანი და ტრანსლაციურად იგივეური ატომების ზონა იდენტურია.

განვიხილოთ $1\frac{1}{2}$ მესერი. განხილვა შეიძლება ორგვარად: იგი შეიძლე-

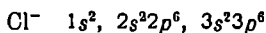
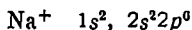
ბა განვიხილოთ როგორც კუბური მესერი — ელემენტარული უჯრედი კუბია, რომელზედაც მოდის ორი ატომი. თითოეული ატომის მდგომარეობა იძლევა თავიანთ ზონას, რომელშიც $2(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობებია, მაგრამ ეს ატომები ტრანსლაციურად იგივე არიან, ამიტომ მათი ზონებიც იდენტურია, ე. ი. ემთხვევიან ერთმანეთს, ამიტომ გვაქვს ერთი ზონა, რომელშიც გვექნება $4(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობები. იგივე შედეგი მიიღება იმ შემთხვევაშიც, თუ $l^{\frac{1}{2}}$ მესერს განვიხილავთ როგორც რომბოედრულს. ელემენტარული უჯრედი რომბოედრია, რომლის მოცულობა ორჯერ ნაკლებია, ვიდრე ელემენტარული უჯრედი — კუბისა. რომბოედრის ერთ უჯრედზე მოდის ერთი ატომი, სამაგიეროდ ელემენტარული უჯრედების — რომბოედრების რიცხვი იქნება $2N$. მაშასადამე, რომბოედრის ატომზე მოდის $2(2l+1)$ კვანტური მდგომარეობები, ამიტომ ზონაში გვექნება $2(2l+1)2N = 4(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობები.

მჭიდროდ მოწყობილი ჰექსაგონალური მესერის შემთხვევაში მდგომარეობა სხვანაირია. თუმცა მესერი შეიცავს იგივე ატომებს, მესერი არ შეადგენს ბრავეს მესერს. ელემენტარულ უჯრედზე მოდის ორი ატომი, მაგრამ ისინი ტრანსლაციურად იგივე არ არიან, ამიტომ მიიღება ზონათა ორი სისტემა, რომლებიც ერთმანეთს არ ემთხვევიან სათანადო ატომების არატრანსლაციური ეკვივალენტობის გამო.

განვიხილოთ მესერი, რომელიც შეიცავს ორ არაერთნაირ ატომს, მაგალითად, მესერი NaCl . Na და Cl^- -ის ატომების ელექტრონული კონფიგურაცია შემდეგია



ცნობილია, რომ NaCl კრისტალი შედგება არა Na და Cl -ის ატომებისაგან, არამედ Na^+ და Cl^- -ის იონებისაგან, რომელთა ელექტრული კონფიგურაცია შემდეგია:



მიიღება ორი ზონა შესაბამისად Na^+ და Cl^- -ის იონებისა. ზონას იძლევიან Na^+ -ის $3s$ ელექტრონები, რომელშიც $2N$ ადგილია და Cl -ის $3p$ ელექტრონები, სადაც $6N$ ადგილია. პირველი ზონა ცარიელია, ხოლო მეორე — მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით. ეს ზონები ერთმანეთს არ ფარავენ.

§ 8. მმტალმბი და არამმტალმბი

ვთქვათ, კრისტალზე გარეგანი ველი არ მოქმედებს, მაშინ ელექტრონები, რომლებიც ზონას ადგენენ, მოძრაობენ ქაოსურად, ე. ი. ელექტრონს, მოძრავს v სიჩქარით ეთანადება მეორე ელექტრონი მოძრავი — v

სიჩქარით, ამიტომ დენი არა გვაქვს. კრისტალს მოვდოთ გარეგანი ველი. ეს უკანასკნელი ააჩქარებს იმ ელექტრონებს, რომლებიც მოძრაობენ ველის საწინააღმდეგო მიმართულებით და დაამუხრუჭებს იმ ელექტრონებს, რომლებიც მოძრაობენ ველის მიმართულებით. ამგვარად, მიიღება ელექტრონების გარკვეული მოწესრიგებული მოძრაობა, რომელსაც ეთანადება ელექტრული დენი. ზონის შიგნით ელექტრონები განაწილებული არიან. კვანტური მდგომარეობის მიხედვით, რომელთა რიცხვი შეზღუდულია. ამიტომ ველის გავლენით ელექტრონმა რომ შეიძინოს გარკვეული სიდიდის ენერგია, აუცილებელია პაულის პრინციპის საფუძველზე, ელექტრონის სათანადო ენერგეტიკული დონე დაკავებული არ იყოს სხვა ელექტრონით. თუ ზონის შიგნით ყველა კვანტური მდგომარეობა დაკავებულია ელექტრონებით, მაშინ გარეგან ველს არ შეუძლია არც ერთი ელექტრონის აჩქარება, ე. ი. ელექტრონების მოძრაობაში ასიმეტრიის ანდა ელექტრული დენის შექმნა, გარდა იმ შემთხვევისა, როდესაც ელექტრონის მიერ მიღებული ენერგია საკმარისია ელექტრონი გადაიყვანოს მოცემული ზონიდან მომდევნო ცარიელ ზონაში. ამისათვის საჭიროა ველი $\sim 10^8$ ვოლტ/სმ, რომლის განხორციელება ლაბორატორიულ პირობებში შეუძლებელია. ამრიგად, თუ ვალენტური ელექტრონების ზონა მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით, კრისტალებში ელექტრულ ველს არ შეუძლია გამოიწვიოს დენი. ამიტომ ასეთი კრისტალები არიან არაგამტარები. თუ ზონა ვალენტური ელექტრონებისა ნაწილობრივ შევსებულია ელექტრონებით, მაშინ ამ კრისტალებში სულ მცირე სიდიდის ელექტრულ ველსაც შეუძლია ელექტრონების მოძრაობაში ასიმეტრიის შექმნა, ვინაიდან ელექტრონს, რომელმაც მიიღო გარკვეული სიდიდის ენერგია ელექტრულ ველში, შეუძლია გადავიდეს ზონის შიგნით დაუკავებელ ადგილებზე. ასეთ სხეულებს უწოდებენ გამტარებს (მეტალებს). მაშასადამე, ზონური თეორიის მიხედვით გამტარებლობა ან არაგამტარებლობა დაკავშირებულია სავალენტო ელექტრონების არა რიცხვთან, არაქედ ზონის შევსებასთან ანდა არშევსებასთან.

გახვიხილოთ რამდენიმე მაგალითი.

1. ავიღოთ კრისტალი Na. ატომების რიცხვი იყოს N . Na-ატომის ელექტრონული კონფიგურაციაა

$$1s^2, 2s^2 2p^6, 3s.$$

ზონას იძლევა $3s$ ელექტრონი. ამ ზონაში გვაქვს $2N$ კვანტური მდგომარეობები. სავალენტო ელექტრონების რიცხვია N (თითო ელექტრონი თითო ატომიდან), ამიტომ ზონა ნახევრად არის შევსებული ელექტრონებით. ზემოთ მოცემული განმარტების თანახმად, Na ტიპური მეტალია. იგივე ითქმის ყველა ერთვალენტური ატომების კრისტალებისათვის.

2. განვიხილოთ II ჯგუფის ელემენტები (მაგალითად, Mg). Mg-ის ატომის ელექტრონული კონფიგურაციაა შემდეგის: $1s^2, 2s^2 2p^6, 3s^2$. ზონას

აძლევიან 3ϵ ელექტრონები. ამ ზონაში $2N$ კვანტური მდგომარეობაა, ამავე დროს სავალენტო ელექტრონების რიცხვი უდრის $2N$ -ს, ე. ი. 3ϵ ზონა მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით. ამიტომ ზემოთ მოცემული განმარტების თანახმად, ეს კრისტალები უნდა იყოს არაგამტარები. სინამდვილეში კი ისინი ტიპიური მეტალებია. ეს გარემოება აიხსნება შემდეგნაირად: თუმცა 3ϵ ზონა სავსებით შევსებულია ელექტრონებით, სამაგიეროდ მომდევნო 3μ ზონა, რომელიც სრულიად ცარიელია ელექტრონებისაგან, ფარავს 3ϵ ზონას, ამიტომ გვაქვს ერთი ზონა, სადაც $8N$ კვანტური მდგომარეობაა ($2N - 3\epsilon$ ზონიდან და $6N - 3\mu$ ზონიდან), ხოლო მათ შესავსებად გვაქვს მხოლოდ $2N$ სავალენტო ელექტრონები, ამიტომ ეს კრისტალები ტიპიური მეტალებია.

3. განვიხილოთ კრისტალი NaCl . იგი შედგება Na^+ და Cl^- იონებისაგან, რომელთა ელექტრონული კონფიგურაცია მოცემული იყო ზემოთ. გვაქვს ორი ზონა შესაბამისი 3ϵ და 3μ ელექტრონებისა. 3μ ზონა ცარიელია, ხოლო 3ϵ ზონა მთლიანად შევსებულია. ცდების მიხედვით, ეს ზონები დაშორებულია ერთმანეთისაგან აკრძალული ზონით. ამიტომ ზემოთ მოცემული განმარტების თანახმად, კრისტალი NaCl არაგამტარია.

ზოგადად შეიძლება ჩამოვაყალიბოთ შემდეგი დებულება: თუ ელექტრონების რიცხვი, რომელიც მოდის ერთ ელემენტარულ უჯრედზე, კენტია, მაშინ ნივთიერება მეტალია. შებრუნებული დებულება არ არის სწორი. თუ ნივთიერება არამეტალია, მაშინ ელემენტარულ უჯრედზე მოდის წყვილი რიცხვი ელექტრონებისა. ანდა სხვანაირად, თუ მესერი შეიცავს ერთნაირ ატომებს, რომლებიც ტრანსლაციურად იგივეურია, მაშინ: ა) თუ ვალენტობა კენტია, ნივთიერება მეტალია. ბ) თუ ნივთიერება არამეტალია, მაშინ ეალენტობა კენტია. გამონაკლისს შეადგენს გარდამავალი ელემენტები, რომლებიც შეიცავენ ნაწილობრივ შევსებულ f და d შრეებს. მიღებულია შემდეგი ტერმინოლოგია: ნაწილობრივ შევსებულ ზონას უწოდებენ გამტარებლობის ზონას, ხოლო უკანასკნელ შევსებულ ზონას — ვალენტურ ანდა ძირითად ზონას. კრისტალის ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტი

$$\sigma = neu, \quad (4.69)$$

სადაც e არის ელექტრონის მუხტი, n — გამტარებლობის ელექტრონების კონცენტრაცია და u — ელექტრონის ძვრადობის კოეფიციენტი. როგორც მეტალებში, ისე არამეტალებში, ელექტრონების ძვრადობის კოეფიციენტი მცირდება ტემპერატურის გადიდებით, რადგან მესერის ატომების სითბური რხევები უფრო ინტენსიური ხდება და იზრდება სითბურ რხევებზე ელექტრონების გაბნევა. როგორც თეორია გვიჩვენებს (თავი VI,), ელექტრონების ძვრადობა ეცემა $\sim T^{-n}$ კანონის მიხედვით, სადაც $n \sim 1 \div 2$. ხოლო, რაც შეეხება გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვს, მეტალებში

ბისა და არამეტალების შემთხვევაში სხვადასხვანაირად იქცევიან ტემპერატურის ცვლილებასა. მეტალების შემთხვევაში, ტემპერატურის გადიდებით გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვი არ იცვლება. გამტარებლობის ზონა ნაწილობრივ არის შევსებული ელექტრონებით, ამიტომ ელექტრონებს შეუძლიათ გადავიდნენ აღებული ზონის შიგნით უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეებზე, რადგან მათი ენერგია იზრდება ტემპერატურის გადიდებით. არამეტალებში კი მდგომარეობა სულ სხვაა: $T=0$ ტემპერატურაზე ვალენტური ზონა მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით, ხოლო გამტარებლობის ზონა, რომელიც მისგან დაშორებულია E_g აკრძალული ზონით, მთლიანად ცარიელია ელექტრონებისაგან (ნახ. 41). $T>0$ ტემპერატურაზე, სიბუთური ფლუქტუაციის შედეგად ყოველთვის მოინახება ისეთი ელექტრონები, რომელთა ენერგია $\geq E_g$, ამიტომ ისინი შეიძლება გადავიდეს ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში (ნახ. 41). ასეთი ელექტრონების რიცხვი, როგორც ამას თეორია გვიჩვენებს (თავი VI), იზრდება ექსპონენციალური კანონით:

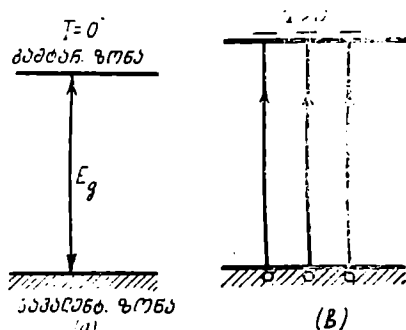
$$n \sim e^{-E_g/2kT}$$

სადაც E_g აკრძალული ზონის სიგანეა.

როგორც ვიცით, ექსპონენციალური კანონი იძლევა უფრო სწრაფ ცვლილებას, ვიდრე ნებისმიერი ხარისხოვანი კანონი. ამიტომ, არამეტალების შემთხვევაში ტემპერატურის გადიდებით გამტარებლობის ელექტრონების კონცენტრაცია ბევრად უფრო სწრაფად იზრდება, ვიდრე ეცემა ძვრადობა. საბოლოოდ მეტალებისა და არამეტალების ნიშანია შემდეგი: ტემპერატურის გადიდებით მეტალების გამტარებლობა ეცემა, არამეტალებისა კი — იზრდება. ძალიან მაღალ ტემპერატურაზე არამეტალების გამტარებლობა შეიძლება გახდეს მეტალების გამტარებლობის რიგისა.

§ 9. ხვრელები. ხვრელური გამტარებლობა. ხვრელების განაწილების ფუნქცია

როგორც წინა პარაგრაფში აღვნიშნეთ, არამეტალების შემთხვევაში კრისტალის გამტარებლობა გამოწვეულია იმ ელექტრონებით, რომლებიც სიბუთური ფლუქტუაციის შედეგად გადაიან ვალენტური ზონიდან გამტარ-



ნახ. 41

რებლობის ზონაში, მასთან ელექტრონების რიცხვი ტემპერატურის გადი-
დებით იზრდება ექსპონენციალური კანონით. მეორე მხრივ, ვალენტური
ზონიდან გამტარებლობის ზონაში გადასული ელექტრონი ვალენტურ ზო-
ნაში ტოვებს ვაკანტურ ადგილს — ზერელს, ამიტომ ახლა ვალენტურ ზო-
ნაში მოთავსებულ ელექტრონებს საშუალება ეძლევათ ველის მოქმედების
შედეგად გადავიდეს აღნიშნულ ვაკანტურ ადგილებზე, ე. ი. მოგვეს სა-
თანადო გამტარებლობა (ელექტრული დენი). § 7-ში ჩვენ ვუჩვენეთ, რომ
ზონის ზედა კიდზე მდებარე ელექტრონს ეთანადება უარყოფითი ეფექ-
ტური მასა. ამიტომ უარყოფითი მასის მქონე ელექტრონის ანალოგიის
გატარება კლასიკური ნაწილაკის მოძრაობასთან ცოტა უხერხულია,
თუმცა ამაში არავითარი უაზრობა არ არის. ადვილი საჩვენებელია, რომ
უარყოფითი ეფექტური მასისა და უარყოფითი ელექტრული მუხტის
მქონე ნაწილაკის მოძრაობა სრულიად ტოლფასია დადებითი ეფექტური
მასისა და დადებითი ელექტრული მუხტის მქონე ნაწილაკის მოძრაობისა.
მართლაც, დადებითი ეფექტური მასისა და უარყოფითი ელექტრული მუხ-
ტის მქონე ნაწილაკის მოძრაობის განტოლება

$$m^* \frac{dv}{dt} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right) \quad (A)$$

$$m^* > 0 \quad \text{და} \quad e < 0$$

შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგნაირად:

$$-m^* \frac{dv}{dt} = -e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right),$$

როდესაც $m^* < 0$, მაშინ $-m^* = m_p > 0$ და $-e = e_p > 0$,

ამიტომ გვექნება

$$m_p \frac{dv}{dt} = e_p \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \right). \quad (B)$$

ამრიგად (B) განტოლება მივიღეთ უშუალოდ (A) განტოლებიდან
(—1)-ზე გამრავლებით, ამიტომ ორივე განტოლება ერთი და იგივეა. სა-
მაგიეროდ (A) განტოლება აგვიწერს $m^* > 0$ და $e < 0$ ნაწილაკის მოძრაო-
ბას, ხოლო (B) განტოლება $m_p > 0$ $e_p > 0$ ნაწილაკის მოძრაობას. მაშა-
სადამე, ნაცვლად იმისა, რომ განვიხილოთ ელექტრონი უარყოფითი ეფექ-
ტური მასით, განვიხილოთ ზერელის მოძრაობა, რომელსაც მივეწერთ
დადებითი ეფექტური მასის დადებით ელექტრულ მუხტს. ამ შემთხვევაში
კლასიკური ნაწილაკის მოძრაობასთან ანალოგიის გატარება უფრო თვალ-
საჩინო ხდება.

მართლაც, როდესაც ელექტრონი ქვედა ენერგიის დონიდან გადადის
ზევით ვაკანტურ ადგილზე — ზერელზე, ზერელი იხურება. სამაგიეროდ,
გადასული ელექტრონის ადგილზე ისევ ჩნდება ზერელი, ე. ი. ზერელი და

ელექტრონი ელექტრულ ველში მოძრაობენ ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულებით, ისე როგორც ამას ადგილი აქვს ელექტრულ ველში დადებითი და უარყოფითი მუხტების შემთხვევაში. მაშასადამე, ვალენტურ ზონაში ელექტრონების გამტარებლობის ნაცვლად შემდეგში ვიხმართ ტერმინს — ხერელურ გამტარებლობას. ამიტომ არამეტალების შემთხვევაში, ნიშნის სრული გამტარებლობა შედგება ელექტრონული (რომლებიც გადავიდნენ ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში) და ხერელური გამტარებლობისაგან

$$\sigma = e(nu_n + pu_p), \quad (4.70)$$

სადაც n და p არის ელექტრონებისა და ხერელების კონცენტრაცია, u_n და u_p ელექტრონებისა და ხერელების ძვრადობის კოეფიციენტები — სათანადოდ.

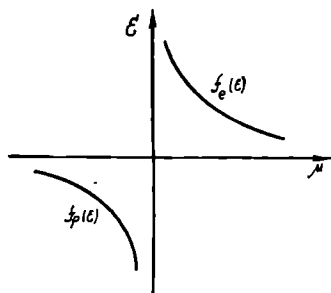
დასასრულს განვიხილოთ ხერელების განაწილების ფუნქცია. როგორც ვიცით, ელექტრონების განაწილება ემორჩილება ფერმი-დირაკის კანონს:

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}, \quad (4.71)$$

რომელიც გვაძლევს ალბათობას იმისა, რომ კვანტური მდგომარეობა ენერგიით E დაკავებულია ელექტრონით, ასეთივე შინაარსი ექნება ხერელების განაწილების კანონს $f_p(E)$. ეს არის ალბათობა იმისა, რომ კვანტური მდგომარეობა ენერგიით E დაკავებულია ხერელით, ანდა, რაც იგივეა, არ არის დაკავებული ელექტრონით. მეორე მხრივ, ყოველი კვანტური მდგომარეობა დაკავებულია ან არ არის დაკავებული ელექტრონით, ე. ი.

$$f_e(E) + f_p(E) = 1.$$

აქედან



ნახ. 42

$$f_p(E) = 1 - f_e(E) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{e^{\frac{\mu-E}{kT}} + 1}. \quad (4.72)$$

როგორც ვხედავთ, ელექტრონებისა და ხერელების განაწილების ფუნქციებს ერთნაირი სახე აქვთ, თუ ელექტრონებისათვის ენერგიას ავთვლით μ -დან ზემოთ, ხერელებისათვის μ -დან ქვემოთ. სათანადო განაწილების ფუნქციები ნაჩვენებია ნახ. 42-ზე.

§ 10. კვანტური მდგომარეობათა სიმკვრივე ზონის
კიდეების მახლობლად

ზონაში ენერგიის ტოლ ინტერვალებში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი ერთმანეთის ტოლი არ არის. თუ ავიღებთ ფაზურ მოცულობას Vd^3p -ს, მაშინ მოცულობის ამ ელემენტში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი იქნება:

$$G(k) dk = \frac{V d^3 p}{h^3} = \frac{2V d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk, \quad (4.73)$$

თავისუფალი ელექტრონის შემთხვევაში

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

მიტომ, თუ k სიდიდიდან გადავალთ E -ზე, მივიღებთ:

$$G(E) dE = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE, \quad (4.74)$$

სადაც $G(E)$ არის კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი, რომელიც ეთანადება ენერგიის ერთეულ ინტერვალს ($dE=1$), მას კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივეს უწოდებენ. ზონის შიგნით კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივის პოვნა მეტად რთულია, ვინაიდან არ ვიცით $E(k)$ ფუნქციის სახე. ქვემოთ დავინახავთ, რომ $G(k)$ ფუნქციის მონახვა ზონის ნაპირების მახლობლად არავითარ სირთულეს არ წარმოადგენს. მართლაც, ეფექტური მასის მიახლოებაში ჩვენ მივიღეთ შემდეგი ფორმულები:

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} k^2,$$

გამტარებლობის ზონის ქვედა და

$$E(k) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_p^*} (k - k_0)^2,$$

ვალენტური ზონის ზედა კიდის მახლობლად. თუ ამ ფორმულებიდან განვსაზღვრავთ k -ს და შემდეგ ჩავსვათ $\frac{V}{\pi^2} k^2 dk$ გამოსახულებაში, კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვისათვის მივიღებთ შემდეგ ფორმულებს:

$$G_e(E) dE = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} dE, \quad (4.75)$$

გამტარებლობის ზონის ქვედა და

$$G_p(E) dE = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E} dE, \quad (4.76)$$

ვალენტური ზონის ზედა ნაპირის მახლობლად. აქ m_e^* და m_p^* ეფექტური მასებია ელექტრონისა და ზერელისა, სათანადოდ, $G_e(E)$ და $G_p(E)$ —კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე ზონის ნაპირის მახლობლად, გამტარებლობის და ვალენტურ ზონაში, სათანადოდ. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, $G(E)$ ფუნქციის პოვნა ზონის შიგნით მეტად რთულ ამოცანას შეადგენს. ზოგადად შეიძლება ითქვას შემდეგი: ზონის ზედა კიდეზე $G(E)=0$, ზონის შიგნით ენერგიის რომელიმე მნიშვნელობაზე მაქსიმუმს აღწევს და ზონის ზედა კიდეზე ისევ უტოლდება ნულს $G(E)=0$.

ახლა განვიხილოთ ის ცდები, რომლებიც საშუალებას იძლევიან დავადგინოთ მიახლოებითი $G(E)$ ფუნქციის სახე. როგორც ვიცით, ზონას იძლევიან სავალენტო ელექტრონები. ჩაკეტილი შიდა შრის ელექტრონების ენერგეტიკული სპექტრი, ისე როგორც იზოლირებულ ატომებში, დისკრეტულია. მოვახდინოთ კრისტალის ბომბარდირება რბილი რენტგენის სხივებით. ამ დროს შესაძლებელია შიდა შრის ელექტრონების ამოგდება. მაშინ განთავისუფლებულ ადგილზე გადავა s ზონის ელექტრონი. თუ ასეთი გადასვლის შესაბამის რენტგენულ გამოსხივებას შევისწავლით, შეიძლება დავადგინოთ მიახლოებით $G(E)$ ფუნქციის სახე.

ასეთივე ტიპის ცდები ჩატარებულ იქნა სკინერისა და ობრაინერის მიერ. განვიხილოთ მაგალითად კრისტალი Na. აქ ზონას გვაძლევენ $3s$ ელექტრონები. ვთქვათ, რენტგენის სხივების ბომბარდირებით ამოგდებულ იქნა $2p$ ელექტრონი. მაშინ განთავისუფლებულ ადგილზე უნდა გადავიდეს $3s$ ელექტრონი. მაგრამ $3s$ ელექტრონებს გააჩნიათ სხვადასხვა ენერგიის მნიშვნელობები ზონის შიგნით, აქიტომ მოსალოდნელია რენტგენული გამოსხივების სპექტრის ზოლს ჰქონდეს s ზონის სიგანე: მართლაც, რენტგენული გამოსხივება იძლევა ზოლს A და $A+E_0$ ინტერვალს შიგნით. სადაც A არის ენერგიათა სხვაობა p ზონისა და s ზონის ქვედა კიდეებს შორის, E_0 არის s ზონის სიგანე. Na-ს შემთხვევაში გვაძლევს $E_0=3eV$ -ს, რაც ძალიან ახლოსაა s ზონის სიგანესთან.

ახლა განვიხილოთ მიღებული რენტგენული გამოსხივების ზოლში ინტენსივობის განაწილება, რომელიც ეთანადება ელექტრონის გადასვლას $3s \rightarrow 2p$ -ში გამოწვეული რენტგენის კვანტით, რომელთა ენერგია მოთავსებულია $A+E$ და $A+E+dE$ -ს შორის.

ინტენსივობის განაწილება ზოლში აღვნიშნოთ $J(E)$ -თი, რომელიც პროპორციულია კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივისა და გადასვლის ალბათობისა, ე. ი.

$$J(E) = G(E) w(E), \quad (4.77)$$

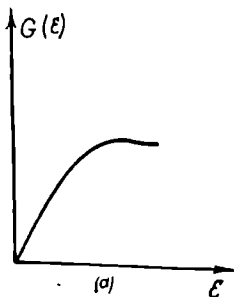
სადაც $w(E)$ არის $3s \rightarrow 2p$ -ში გადასვლის ალბათობა, მისთვის დადგენილია თეორიული ფორმულა

$$w(E) \simeq (A+E)^3. \quad (4.78)$$

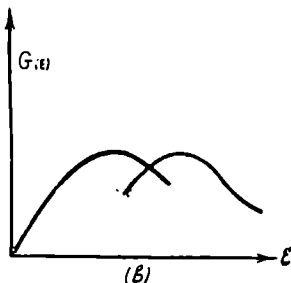
ცდაზე იზომება ინტენსივობის განაწილება $J(E)$, შემდეგ (4.78) ფორმულის გამოყენებით (4.77) განტოლებიდან განისაზღვრება $G(E)$ ფუნქციის სახე, ასეთი ცდები ტუტე მეტალის შემთხვევაში იძლევიან ნახ. 43-ზე ნაჩვენებ მრუდს. ამ მრუდის დასაწყისი საკმარისად აიწერება პარაბოლით

$$G(E) \sim \sqrt{E}.$$

ენერგიის გადიდებით პარაბოლის მრუდიდან გადახრა იზრდება, რაც სავსებით გასაგებია ზემოთ მოცემული თეორიის მიხედვით. სხვა მეტალების შემთხვევაში მრუდს უფრო რთული სახე აქვს (ნახ. 43). ამ მრუდე-



ნახ. 43 (ა)



ნახ. 43 (ბ)

ბის მიხედვით შეიძლება ვიმსჯელოთ, რომ (ა) მრუდი ეთანადება იმ შემთხვევას, როდესაც ადგილი არა აქვს ზონების გადაფარვას, ხოლო (ბ) — ზონების გადაფარვას.

ჩვენ ზემოთ განვიხილეთ $3s \rightarrow 2p$ გადასვლები. შესაძლებელია აგრეთვე $s \rightarrow s$ გადასვლები, მაგრამ მათი ალბათობა ძალზე მცირეა.

§ 11. ძრისტალში ელემენტარონის ლოკალიზებული მდგომარეობა

ჩვენ აქამდე ვიხილავდით ელექტრონის მოძრაობას მესერის პერიოდულ ველში და ვუჩვენეთ, რომ ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრი შედგება აკრძალული და დასაშვები ზონებისაგან. რეალური კრისტალი ყოველთვის შეიცავს დეფექტების გარკვეულ რაოდენობას. ისინი ქმნიან ლოკალურ ველს, რომელიც ედება $V(r)$ პერიოდულ ველს და სათანადოდ ამახინჯებს მას. თუ ლოკალურ ველს აღვნიშნავთ $U(r)$ -ით, მაშინ შრედინგერის სათანადო განტოლებას ექნება სახე

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + (E - V(r) + U(r)) \psi = 0. \quad (4.79)$$

ამ განტოლების ამოხსნა ზოგად შემთხვევაში, როდესაც მოცემულია U -ს კონკრეტული სახე, მეთისმეტად რთულია. ამიტომ დამახინჯებულ პერიოდულ ველში ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრის დასადგენად გამოვიყენებთ ეფექტური მასის მეთოდს, რომელიც მოცემული იყო § 2-ში. ამ მეთოდის შინაარსი მდგომარეობს იმაში, რომ (4.79) განტოლებაში პერიოდული ველი შეიძლება ამოღებული იქნეს, სამაგიეროდ ელექტრონის ნამდვილი მასა უნდა იქნეს შეცვლილი ეფექტური მასით. ეს მეთოდი შეიძლება გამოყენებული იქნეს იმ შემთხვევაში, როდესაც $U(r)$ ფუნქცია ძალიან ნელა იცვლება მესერის პარამეტრის მანძილზე. ამრიგად (4.79) განტოლება ეფექტური მასის მიახლოებაში შეიძლება შეიცვალოს შემდეგი განტოლებით

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi + (E + U(r)) \psi = 0. \quad (4.80)$$

ქვემოთ ნაჩვენები იქნება, რომ მინარევი ატომები (დონორები და აქცეპტორები) ქმნიან ლოკალურ ველს, რომელიც საკმარისი სიზუსტით აღწერება კულონის კანონით

$$U(r) = \frac{e^2}{\kappa r},$$

სადაც κ არის კრისტალის დიელექტრიკული მუდმივა.

ამ შემთხვევაში (4.80) განტოლება დაიყვანება წყალბადისმაგვარი ატომის პრობლემაზე, რომელიც გვაძლევს ენერგიის დისკრეტულ სპექტრს აკრძალულ ზონაში, გამტარობის ანდა ვალენტური ზონის კიდეების მახლობლად. რადგან ნახევარგამტარების ფიზიკური თვისებები ძირითადად დაკავშირებულია დონორებისა და აქცეპტორების კონცენტრაციასა და ბუნებაზე, ამიტომ მათი ენერგეტიკული სპექტრის დეტალური განხილვა ეფექტური მასის მეთოდის გამოყენებით მოცემული იქნება შემდეგ თავში.

დეფექტები კრისტალებში

რეალური კრისტალების სტრუქტურა მეტ-ნაკლებად განსხვავდება იდეალური სტრუქტურისაგან. მაგალითად, მოცემულ ტემპერატურაზე კრისტალის რეგულარული ატომების გარკვეული რაოდენობა გადასულია მესერის კვანძებიდან კვანძთა შორის სივრცეში და ამგვარად ქმნიან იდეალური სტრუქტურის სათანადო დამახინჯებას. გარდა ამისა, ყოველ რეალურ კრისტალში გვაქვს მინარევების სახით სხვადასხვა ნივთიერების ატომების გარკვეული რაოდენობა, რომლებიც იკავებენ მესერის ვაკანტურ კვანძურტილებს (თუ მინარევი ატომი ჩანაცვლებითია), ანდა კვანძთა შორის ადგილებს (თუ მინარევი ატომი ჩანერგვითია). ასეთი სახის დეფექტებს უწოდებენ მიკროსკოპულს. გარდა მიკროსკოპული დეფექტებისა, რეალურ კრისტალში გვაქვს აგრეთვე მაკროსკოპული ზომის დეფექტები, როგორიცაა მაგალითად ნაპრალები, დისლოკაციები და სხვ. როგორც ქვემოთ დავინახავთ, კრისტალი გარკვეული რაოდენობის დეფექტებით უფრო ხელსაყრელია, ვიდრე დეფექტების გარეშე. ეს უშუალოდ გამომდინარეობს კრისტალის თავისუფალი ენერგიის მინიმუმის პირობიდან. დეფექტების ამ რაოდენობას უწოდებენ წონასწორულს.

დეფექტების ფაქტიური რაოდენობა რეალურ კრისტალებში, როგორც წესი, რამდენიმე რიგით აღემატება მის წონასწორულ მნიშვნელობას მოცემულ ტემპერატურაზე. დეფექტების ამ ქარბი რიცხვის ან არაწონასწორული რიცხვის წარმოშობის მიზეზი მრავალია. მათ შორის ზოგიერთი განხილული იქნება ქვემოთ. ვინაიდან კრისტალური სხეულების მთელი რიგი თვისებები დაკავშირებულია მასში არსებული დეფექტების ბუნებასა და მათ კონცენტრაციაზე, ამიტომ ამ თავში ჩვენ შევხებით მხოლოდ ისეთ დეფექტებს, რომლებიც წარმოიშობიან ძირითადად კრისტალის ზრდის პროცესში, მაგალითად, ფრენკელისა და შოტკის ტიპის დეფექტები, დისლოკაციები, შეღებვის ცენტრები, ანტისტრუქტურული მოუწესრიგებლობა და სხვ. ხოლო რაც შეეხება ხელოვნურად შეტანილი დეფექტების გავლენას კრისტალის ფიზიკურ თვისებებზე, დეტალურად

განხილული იქნება შემდეგ თავებში. საჭიროა აღინიშნოს ისიც, რომ ზოგადი გაგებით ელექტრონები, ზერელები, ატომების სითბური რხევები—ფონონები, აგრეთვე წარმოადგენენ დეფექტებს, მაგრამ ვინაიდან ეს ნაწილაკები წარმოადგენენ მყარი სხეულის ძირითად ერთეულს, ამიტომ მათი ცალკე თავად გამოყოფა მიზანშეწონილი არ იქნება.

§ 1. მკანძალისა და მოტკის ტიპის დეფექტები

რაოდესაც კრისტალის რეგულარული ატომი (იონი) გადადის მესერის კვანძიდან კვანძთაშორის სივრცეში, მიიღება ერთი ვაკანსია (თავისუფალი კვანძი) და ერთი კვანძთაშორისი ატომი (იონი). ასეთ წყვილს უწოდებენ ფრენკელის ტიპის დეფექტებს. თუ კრისტალში გვაქვს მხოლოდ ვაკანსიები, მაშინ მათ მოტკის ტიპის დეფექტებს უწოდებენ. შეიძლება ვუჩვენოთ მოტკისა და ფრენკელის ტიპის დეფექტების წარმოშობის მრავალი მექანიზმი. ასე, მაგალითად, ატომები, რომლებიც გადავიდნენ კვანძებიდან კვანძთა შორის სივრცეში, დიფუზიის გზით შეიძლება ამოვიდნენ კრისტალის ზედაპირზე და შექმნან ახალი ატომური ფენა ანდა აორთქლდნენ ზედაპირიდან. ორივე შემთხვევაში კრისტალის მოცულობაში გაჩნდებიან გარკვეული რაოდენობის ვაკანსიები—მოტკის ტიპის დეფექტები. პირველ შემთხვევაში ატომების საერთო რიცხვი არ იცვლება, მოცულობა კი იზრდება. მეორე შემთხვევაში ატომების რიცხვი მცირდება, სამაგიეროდ მოცულობა უცვლელი რჩება. ორივე შემთხვევაში კრისტალის სიმკვრივე მცირდება. როდესაც ატომები გადადიან კვანძებიდან კვანძთა შორის სივრცეში, ატომების საერთო რაოდენობა და ასევე კრისტალის მოცულობა არ იცვლება (პირველი მიახლოებით). ამიტომ ფრენკელის ტიპის დეფექტების წარმოშობის დროს კრისტალის სიმკვრივე არ იცვლება.

კრისტალის ზედაპირზე მყოფი ატომების გარკვეული რაოდენობა შეიძლება გადავიდეს გაზურ ფაზაში, მაშინ ისინი კრისტალის ზედაპირზე დატოვებენ ვაკანსიებს, რომელზედაც შეიძლება გადმოვიდეს კრისტალის მოცულობაში მდებარე ატომები. ისინი თავის მხრივ ტოვებენ ვაკანსიებს, რომელზედაც შეიძლება გადმოვიდეს სხვა ატომები და ამრიგად მოხდება კრისტალის ზედაპირზე გაჩენილი ვაკანსიების დიფუზიონური მოცულობაში.

სრულიად ანალოგიურად, იმავე ნივთიერების გაზური ფაზიდან ატომების გარკვეული რაოდენობა შეიძლება დაჯდეს კრისტალის ზედაპირზე, რომლებიც შემდეგ კვანძთა შორის სივრცეში დიფუზიის გზით აღმოჩნდეს მოცულობაში. ამრიგად, შესაძლებელია ვაკანსიებისა და კვანძთაშორისი ატომების გაჩენის მრავალი დამოუკიდებელი მექანიზმი. ამიტომ მათი წონასწორული რიცხვი შეიძლება მნიშვნელოვნად განსხვავდებოდეს ერთ-

მანეთისაგან, ახლა განვსაზღვროთ შოტკისა და ფრენკელის ტიპის დეფექტების წონასწორული რიცხვი.

ა) შოტკის ტიპის დეფექტების წონასწორული რიცხვი

ყოველი დეფექტის წარმოშობა დაკავშირებულია ენერგიის დახარჯვასთან, ამიტომ დეფექტების რიცხვის გადიდებით იზრდება კრისტალის როგორც ენერგია, ასევე ენტროპია. მეორე მხრივ, კრისტალის თავისუფალი ენერგია

$$F = E - TS, \quad (5.1)$$

ამიტომ მოცემულ ტემპერატურაზე ყოველთვის მოინახება დეფექტების ისეთი რაოდენობა, რომელსაც ეთანადება თავისუფალი ენერგიის მინიმუმი.

აღვნიშნოთ ერთი დეფექტის—ვაკანსიის წარმოშობის ენერგია E -თი; თუ დეფექტების—ვაკანსიების რიცხვი არის n და დეფექტებს შორის ურთიერთქმედებას აღვილი არა აქვს, მაშინ n დეფექტის—ვაკანსიის წარმოშობის ენერგია იქნება nE . მეორე მხრივ, თუ კვანძების საერთო რიცხვი არის N , მაშინ n ვაკანსია შეიძლება მიღებული იქნეს N კვანძიდან

$$P = \frac{N!}{n! (N-n)!} \quad (5.2)$$

სხვადასხვა საშუალებებით. P -ს ეწოდება თერმოდინამიკური ალბათობა, რომლის ლოგარითმი ენტროპიის ცვლილების (ნაზრდის) პირდაპირპროპორციულია, ე. ი. $S = k \ln P$.

ამრიგად, კრისტალის თავისუფალი ენერგიისათვის ვღებულობთ:

$$F = F_0 + nE - kT \ln P.$$

სტირლინგის მიახლოებითი ფორმულის

$$\ln x! \simeq x \ln x - x$$

გამოყენებით ვღებულობთ:

$$\begin{aligned} \ln P &\simeq N \ln N - N - n \ln N - (N-n) \ln (N-n) + N - n = \\ &= -n \ln n - (N-n) \ln (N-n). \end{aligned}$$

თავისუფალი ენერგიის მინიმუმის პირობა $\delta F = 0$ გვაძლევს

$$\frac{n}{N-n} = e^{-E/kT},$$

ანდა

$$n \simeq N e^{-E/kT}, \quad (5.3)$$

ამ ფორმულით განისაზღვრება T ტემპერატურაზე ვაკანსიების წონასწორული რიცხვი. ეს არის კარგად ცნობილი ბოლცმანის კანონი.

ბ) ფრენკელის ტიპის დეფექტების წონასწორული რიცხვი

ფრენკელის ტიპის ერთი დეფექტის წარმოშობის ენერგია აღენიშნოთ E_f -თი, ხოლო მათი რიცხვი n -ით, მაშინ კრისტალის ენერგიის ნაზრდი იქნება nE_f . ხოლო რაც შეეხება ენტროპიის ნაზრდს, იგი გამოითვლება შემდეგნაირად: ვინაიდან n ფრენკელის ტიპის დეფექტი შეიცავს n ვაკანსიას და n კვანძთა შორის ატომს, ამიტომ n ვაკანსია შეიძლება განხორციელებული იქნეს

$$\frac{N!}{n! (N-n)!}$$

საშუალებებით, სადაც N არის კვანძების საერთო რიცხვი. ანალოგიურად, n კვანძთა შორის ატომი $N' \simeq N$ კვანძთა შორის წერტილებში შეიძლება განაწილდეს

$$\frac{N!}{n! (N'-n)!}$$

საშუალებებით.

ამრიგად თერმოდინამიკური ალბათობა

$$P = \frac{N!}{n! (N-n)!} \cdot \frac{N!}{n! (N'-n)!} \simeq \left(\frac{N!}{n! (N-n)!} \right)^2.$$

თავისუფალი ენერგიისათვის გვექნება

$$F = F_0 + nE_f - kT \ln P = F_0 + nE_f - 2kT \ln \frac{N!}{n! (N-n)!}.$$

აქედან $\partial F = 0$ გვაძლევს

$$n = \sqrt{NN'} e^{-E_f/2kT} \simeq N e^{-E_f/2kT}. \quad (5.4)$$

ეს ფორმულა არაფრით არ განსხვავდება (5.3) ფორმულისაგან, თუ მხედველობაში მივიღებთ, რომ ამ შემთხვევაში E_f არის ერთი ვაკანსიისა და ერთი კვანძთაშორისი ატომის წარმოშობის ენერგია. თუ მივიღებთ, რომ ამ ენერგიის ნახევარი ეთანადება ვაკანსიას, ხოლო მეორე ნახევარი კვანძთა შორის ატომის წარმოშობას, ე. ი. $E_f = 2E$, მაშინ (5.4) ფორმულა გადადის (5.3) ფორმულაში. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ნებისმიერი დეფექტის წონასწორული კონცენტრაცია მოიცემა ბოლცმანის კანონით, სადაც E მოცემული ტიპის დეფექტის გაჩენის ენერგიაა.

წარმოდგენა რომ ვიქონიოთ დეფექტების რაოდენობაზე, განვიხილოთ მაგალითი: ვთქვათ $E = 1 \text{ eV}$ და $T = 300^\circ \text{K}$, მაშინ, თანახმად (5.3) ფორმულისა, მივიღებთ

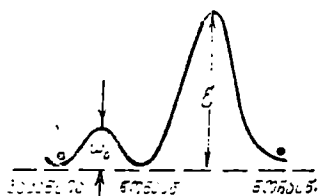
$$n/N \sim 10^{-17}.$$

ამრიგად, ოთახის ტემპერატურაზე და მის ქვემოთ დეფექტები თითქმის არა გვაქვს, მაგრამ თუ ავიღებთ $T = 1000^\circ \text{K}$, მაშინ $n/N \sim 10^{-5}$. რო-

გორც ვხედავთ, ტემპერატურის გადიდებით დეფექტების რაოდენობა სწრაფად იზრდება. თუ $E > 2eV$, მაშინ დეფექტების რაოდენობა მაღალ ტემპერატურაზე ძალზე მცირეა. ცდები გვიჩვენებენ, რომ დაბალ ტემპერატურაზედაც რეალურ კრისტალებში დეფექტების საკმარისად დიდი რაოდენობა გვაქვს. ეს გარემოება, როგორც ზემოთ იყო ნათქვამი, დაკავშირებულია მრავალ ფაქტთან, ასე მაგალითად: დაბალ ტემპერატურაზე დეფექტების დიდი რაოდენობა შეიძლება მიღებული იქნეს, თუ კრისტალს გავახურებთ ძალიან მაღალ ტემპერატურაზე და შემდეგ უტბად გავაცივებთ მოცემულ ტემპერატურამდე. ამ დროს მაღალი ტემპერატურის შესაბამისი დეფექტების წონასწორული რიცხვი შეიძლება „გაიყინოს“ მოცემულ ტემპერატურაზე. ამგვარად მიღებული დეფექტები მეტასტაბილური იქნება. მაგრამ ზოგიერთ შემთხვევაში მათი რელაქსაციის დრო იმდენად დიდია, რომ ფაქტიურად მეტასტაბილური მდგომარეობა ძალიან დიდხანს დარჩება. ქვემოთ ნაჩვენები იქნება აგრეთვე მიკროსკოპიული დეფექტების წარმოშობის ბევრად უფრო ეფექტური წყარო, რომელიც დაკავშირებულია დისლოკაციებთან. გარდა ამისა, კრისტალში დეფექტების არაწონასწორული რიცხვი შეიძლება წარმოიშვას თვით კრისტალის ზრდის პროცესში იმ გაუთვალისწინებელი მიზეზების გამო, რომელიც ხელს უშლის იდეალური სტრუქტურის წარმოშობას.

§ 2. დიფუზიის მექანიზმი. იონური გამტარუნარიანობა

როგორც ცნობილია, მყარი სხეულის ნაწილაკები აწარმოებენ სითბურ რხევებს წონასწორობის მდგომარეობის ირგვლივ. დროგამოშვებით ისინი გადადიან წონასწორობის ერთი მდგომარეობიდან მეორეში. ამ დროს მათ უზღუდავად საკმაოდ დიდი სიმაღლის პოტენციალური ბარიერის გადალახვა, რის გამოც მათი გადატანითი მოძრაობის სიჩქარე რამდენიმე რიგით ნაკლები ხდება, ვიდრე სითხეებსა და გაზებში. პოტენციალური ბარიერის

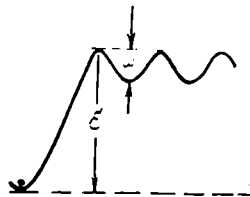


ნახ. 44.

სიმაღლე ძალზე მცირდება, როდესაც ნაწილაკის გვერდით მოთავსებულია ვაკანსია (ხვრელი), ამ დროს ნაწილაკის გადასვლის ალბათობა მარცხნივ ან მარჯვნივ ერთმანეთის ტოლი არ არის. ნახ- 44-ის თანახმად, წონასწორობის მდგომარეობაში მყოფ ნაწილაკს უზღუდავად სიმაღლის ბარიერის გადალახვა

იმისათვის, რომ დაიკავოს ვაკანსია, ხოლო მარჯვნივ მხარეზე მდებარე წონასწორობის წერტილის დასაკავებლად საჭიროა $E \gg \epsilon_0$ ბარიერის გადალახვა. როდესაც წონასწორობაში მყოფი ნაწილაკი გადადის ვაკანტიურ ადგილზე, ეს უკანასკნელი დაიხურება, სამაგიეროდ გადმოსული ნაწილა-

კის ადგილზე გაჩნდება ახალი ვაკანსია და ა. შ. ნაწილაკების მოძრაობას ერთი გარკვეული მიმართულებით ეთანადება ვაკანსიების მოძრაობა საწინააღმდეგო მიმართულებით, ამიტომ მესერის ნაწილაკების დიფუზიის ნაცვლად შეიძლება ვილაპარაკოთ ვაკანსიების დიფუზიაზე. სიდიდეს w -ს უწოდებენ აქტივაციის ენერგიას დიფუზიისათვის. თუ კრისტალში გვაქვს ფრენკელის ტიპის დეფექტები, მაშინ ვაკანსიების დიფუზიასთან ერთად საჭიროა კვანძთა შორის ნაწილაკების დიფუზიის განხილვა. ნახ. 45-ზე ნაჩვენებია ენერგეტიკული სურათი, რო-



ნახ. 45.

დესაც მესერის რეგულარული ნაწილაკი გადადის კვანძიდან კვანძთა შორის სივრცეში. აქ ϵ წარმოადგენს ნაწილაკის დისოციაციის (კვანძიდან კვანძთა შორის სივრცეში გადასვლის) ენერგიას, w —დიფუზიის აქტივაციის ენერგიას კვანძთა შორის ნაწილაკებისათვის. ამრიგად, რეალურ კრისტალებში დეფექტების არსებობა ხელს უწყობს ნაწილაკების დიფუზიურ მოძრაობას. ყოველი ნაწილაკი (კვანძთა შორის მდებარე ანდა ვაკანსიის მახლობლად მდებარე) წონასწორობის გარშემო ირხევა ν სიხშირით, ამიტომ იგი წამში ν -ჯერ ეჩახება ბარიერს. თითოეული დაჯახებისას ბარიერში გავლის ალბათობა $\sim e^{-w/kT}$ -ს, ხოლო წამში ბარიერში გავლის ალბათობა $w = \nu e^{-w/kT}$. w -ს შებრუნებული სიდიდე $\frac{1}{w}$ წარმოად-

გენს დროის იმ ინტერვალს, რომლის განმავლობაშიც ნაწილაკი ირხევა აღებული წონასწორობის წერტილის ირგვლივ, ამიტომ $\tau = \tau_0 e^{w/kT}$, სადაც $\tau_0 = \frac{1}{\nu} \sim 10^{-13}$ სექ. არის ატომის რხევის პერიოდი მესერში. ამრი-

გად, საშუალოდ τ დროის განმავლობაში ნაწილაკი გადადის წონასწორობის ერთი მდგომარეობიდან მეორეში და მაშასადამე, a/τ იქნება ნაწილაკის მოძრაობის საშუალო სიჩქარე მესერში, სადაც a არის მეზობელ ატომებს შორის მანძილი. თანახმად ამ ფორმულისა, დაბალ ტემპერატურაზე ატომების გადანაცვლებითი სიჩქარე იმდენად მცირეა, რომ პრაქტიკულად ატომები გადატანით მოძრაობაში არ ღებულობენ მონაწილეობას. მაგრამ, ტემპერატურის გადიდებით ატომების ასეთი გადატანა ანდა დიფუზიური მოძრაობა საგრძნობი ხდება.

დიფუზიის კოეფიციენტისათვის ცნობილია შემდეგი ფორმულა

$$D = \frac{D^0}{6\tau} \quad (D^0 \sim a^2)$$

$$D = \frac{\delta^2}{6\tau_0} e^{-\omega/kT}. \quad (5.6)$$

იონური კრისტალების შემთხვევაში კრისტალის შემადგენელ ნაწილაკებს შეადგენენ დადებითი და უარყოფითი იონები. ამიტომ ასეთ კრისტალებში გვაქვს შემდეგი სახის დეფექტები: დადებითი და უარყოფითი ვაკანსიები და კვანძთაშორისი იონები, რომელთა კონცენტრაცია მოიცემა ბოლცმანის კანონით:

$$n = N e^{-E/kT}$$

სადაც E არის უარყოფითი და დადებითი ვაკანსიების გაჩენის ენერგიის ნახევარი. მეორე მხრივ, იონების ძვრადობა დიფუზიის კოეფიციენტთან დაკავშირებულია აინშტაინის ფორმულით

$$\mu = \frac{e}{kT} D = \frac{e}{kT} \frac{\delta}{6\tau_0} e^{-\omega/kT}$$

ამიტომ ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტისათვის ვღებულობთ

$$\sigma = ne\mu = \frac{Ne^2\delta^2}{6\tau_0 kT} e^{-\frac{E+\omega}{kT}} = \sigma_0 e^{-\frac{E+\omega}{kT}}. \quad (5.7)$$

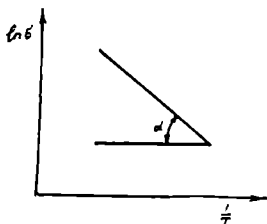
ფრენკელის ტიპის დეფექტების შემთხვევაში

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_f+2\omega}{2kT}}. \quad (5.8)$$

სრული გამტარებლობა შეიცავს (5.7) ტიპის 4 წევრს, რომლებიც ეთანადებიან დადებითი და უარყოფითი ვაკანსიების და კვანძთაშორისი იონების მოძრაობას. მაგრამ რეალურ კრისტალში პრაქტიკულად ერთი წევრი ბევრად სჭარბობს დანარჩენს, ამიტომ გამტარებლობა მოცემულია (5.7) ან (5.8) ფორმულით. თანახმად (5.7) ფორმულისა

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{E+\omega}{k} \frac{1}{T}$$

თუ გრაფიკზე გადავიტანთ $\ln \sigma$ დამოკიდებულებას $\frac{1}{T}$ -გან, მივიღებთ სწორ ხაზს,



ნახ. 46.

(ნახ. 46), რომლის საკუთხო კოეფიციენტი გვაძლევს $\frac{E+\omega}{k}$ ანდა $\frac{E_f+2\omega}{2k}$ მნიშვნელობას. როგორც ვხედავთ, დეფექტების წარმოშობისა და მათი ძვრადობის შესწავლის საუკეთესო საშუალებას წარმოადგენს იონური

გამტარებლობის გამოკვლევა. კერძოდ, ამ მიზნით სწავლობენ ტუტეპალაიდური კრისტალების გამტარებლობას, როდესაც მასში დამატებულია ორვალენტოვანი ატომების გარკვეული (ზუსტად ცნობილი) რაოდენობა. მეთოდის შინაარსი მდგომარეობს შემდეგში: იღებენ კრისტალს KCl -ის რაზდენიმე ნიმუშს და მასში შეყავთ დამატებით ზუსტად გარკვეული რაოდენობა $CeCl_2$ ატომებისა. ამ შემთხვევაში ცდები გვიჩვენებენ, რომ კრისტალის სიმკვრივის ცვლილება ისეთია, თითქოს K^+ იონის მიერ დატოვებული ვაკანსიები შეცვლილი იყოს Ce^{++} იონებით. თანახმად ცდისა, $CeCl_2$ ატომების დამატება კრისტალის სიმკვრივეს ამცირებს. ეს გარემოება მრავალთმებს იმაზე, რომ ამ დროს კრისტალში ადგილი აქვს ვაკანსიების წარმოშობას, წინააღმდეგ შემთხვევაში $CeCl_2$ ატომების დამატება კრისტალის სიმკვრივეს გაზრდიდა. ცხადია, კრისტალის ელექტრონეიტრალობის პირობის დასაცავად საჭიროა ყოველ წარმოშობილ ვაკანსიას ეთანადებოდეს თითო Ce^{++} იონი, რომელიც კრისტალში იკავებს კატიონის ვაკანსიას. ანალოგიური ცდები ჩატარებულ იქნა ტუტეპალაიდურ კრისტალებზე, რომელსაც დამატებული აქვს Cd , Ca , Sr მეტალის ატომები. ცდები იძლევიან შემდეგ დასკვნებს:

ა) იონური გამტარებლობა მოცემულ ტემპერატურაზე პირდაპირპროპორციულია დამატებული ორვალენტოვანი მეტალების ატომების რიცხვისა და, რადგანაც ამ დროს ადგილი აქვს კათოდზე ძირითადად ერთვალენტოვანი მეტალების (და არა დამატებული ორვალენტოვანი მეტალების ატომების) გამოყოფას, შეიძლება დავასკვნათ, რომ ყოველ დამატებულ ორვალენტოვანი მეტალის ატომზე მოდის ერთი ვაკანსია.

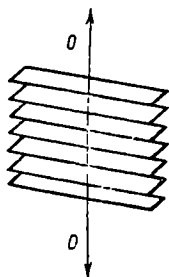
ბ) გარკვეული ტემპერატურის ზევით იონური გამტარებლობა არ არის დამოკიდებული დამატებული ორვალენტოვანი მეტალების ატომების რიცხვზე: ამ დროს გამტარებლობა ხდება საკუთარი. კრისტალის სიმკვრივის გაზომვის საფუძველზე აკეთებენ დასკვნას, რომ საკუთარი გამტარებლობის პროცესი ტუტეპალაიდურ კრისტალებში ხორციელდება ვაკანსიების დიფუზიით, ვერცხლის ჰალოგენიდებში — კვანძთა შორის იონების მოძრაობით, ვინაიდან ასეთ კრისტალებში, ცდების თანახმად, ძირითადად წარმოიშობიან ფრენკელის და არა შოტკის ტიპის დეფექტები.

დასასრულს საჭიროა აღინიშნოს ისიც, რომ დეფექტების გაჩენის ენერგია ძლიერ გავლენას ახდენს კრისტალების სითბოტევადობაზე.

§ 3. დ ი ს ლ ო კ ა ტ ი ა

დისლოკაციის თეორია წარმოადგენს კრისტალთა პლასტიკური დეფორმაციის მიკროსკოპული თეორიის ჩამოყალიბების პირველ ცდას. კრისტალთა პლასტიკური დეფორმაციის ფენომენოლოგიური მიკროსკოპული თეორია საშუალებას არ იძლევა ავხსნათ მთელ რიგ ცდებზე დაშვებული მოვლენები, მაგალითად, ცნობილია, რომ კრისტალის $O-O$ მი-

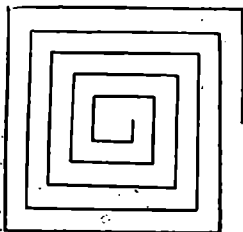
მართლებით გაჭიმვის (დეფორმაციის) დროს ადგილი აქვს ატომური სიბრტყეების ერთმანეთის მიმართ წანაცვლებას, რის შედეგად კრისტალის გვერდით ზედაპირებზე მიიღებიან ეგრეთ წოდებული წანაცვლების ზოლები (ნახ. 47).



ნახ. 47.

წანაცვლების ზოლების წარმოშობა დაკავშირებულია იმ მხებ ძაბვებთან (დაჭიმულობის ტენზორის არადიაგონალური ელემენტები), რომლებიც წარმოიშობიან დეფორმაციის დროს. ვინაიდან მეზობელ ატომურ სიბრტყეებს შორის მანძილი 10^{-8} სმ-ის რიგისაა, მოსალოდნელია ასეთი სისქე წანაცვლების ზოლებს ჰქონოდა. მაგრამ თანახმად ცდებისა, წანაცვლების ზოლების სისქე იცვლება 10^{-3} — 10^{-4} -ს სმ-ის ფარგლებში, რაც მიგვითითებს იმაზე, რომ პლასტიკური ძვრის მიმართ ყველა ატომური სიბრტყე ერთმანეთის ეკვივალენტური არ არის. ეს საფუძვეთზე გაუგებარია კრისტალის ატომური სტრუქტურის თვალსაზრისით. ცდები გვიჩვენებენ აგრეთვე, რომ მხები ძაბვის ის მნიშვნელობა, რომელზედაც დაიშვირება პლასტიკური ძვრა—წანაცვლება, სამი-ოთხი რიგით ნაკლებია მხები ძაბვის იმ მნიშვნელობაზე,

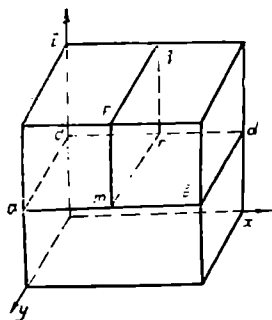
რომელიც მიიღება თეორიული გზით ატომებს შორის ურთიერთქმედების ძალებზე დაყრდნობით, ასეთი უზარმაზარი განსხვავება მხები ძაბვის თეორიულსა და ექსპერიმენტულ მნიშვნელობებს შორის შეუძლებელია აეხსნათ იმით, რომ ჩვენი ცნობები ატომებს შორის ურთიერთქმედების ძალების შესახებ მიახლოებითია, ამიტომ პლასტიკური ძვრის მექანიზმი უნდა ეძიოთ სულ სხვა მიმართულებით. ფენომენოლოგიური თეორიის საფუძველზე შეუძლებელია გაგებულ იქნეს აგრეთვე მთელი რიგი სხვა მოვლენებიც, მაგალითად, კრისტალის ზრდის მექანიზმი და მის ზედაპირზე „ზრდის ფიგურების“ წარმოშობა (ნახ. 48), კრისტალის გამაგრება ცივი დამუშავების დროს, რეკრისტალიზაციის და დაბერების მექანიზმი, ნელი და სწრაფი დენადობის მექანიზმი და სხვა. ყველა ამ მოვლენის ასახსნელად 1934 წელს ტელიორისა და ოროვანის მიერ შემოტანილ იქნა ახალი ტიპის დამახინჯებანი კრისტალებში, რომელიც ამჟამად ცნობილია დისლოკაციის სახელით. მათ მიერ განხილული იყო ორი ტიპის დისლოკაცია—ხაზოვანი და ხრახნული. პირველი შემოტანილი იყო პლასტიკური დეფორმაციისა და მასთან დაკავში-



ნახ. 48.

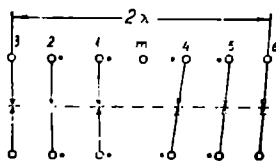
რებული საკითხების, ხოლო მეორე—კრისტალის ზედაპირზე „ზრდის ფიგურების“ ასახსნელად. კრისტალში დამახინჯების ეს სახე, როგორც ამას ქვემოთ დავინახავთ, განსხვავდება მიკროსკოპული დამახინჯებისაგან (ვაკანსიები, კვანძთა შორის ატომები და სხვა) იმით, რომ მათი მოძრაობა დაკავშირებულია სხეულის ფორმის შეცვლასთან, მაშინ როდესაც მიკროსკოპული დეფექტების მოძრაობა სრულებით არ უკავშირდება სხეულის ფორმის შეცვლას და ცდაზე დამზერილი პლასტიკური დეფორმაცია წარმოადგენს კრისტალში დისლოკაციის გავლის შედეგს.

ხაზოვანი დისლოკაციის უმარტივესი სახე შეიძლება მიღებულ იქნეს შემდეგი სახით: დავუშვათ, რომ $abcd$ სიბრტყის საშუალებით კრისტალი გაყოფილია ორ ნაწილად (ნახ. 49). წარმოვიდგინოთ, რომ კრისტალის ზედა ნახევარში მეზობელ ატომურ სიბრტყეებს შორის ჩამატებულია ერთი ატომური სიბრტყე $mnpq$. ამ



ნახ. 49.

დროს $mnpq$ სიბრტყის მარჯვენა მხარეზე მდებარე ატომები მიიღებენ წანაცვლებას Ox ღერძის, ხოლო მარჯვენა მხარეზე მდებარე ატომები— Ox ღერძის საწინააღმდეგო მიმართულებით. ამასთან ატომების წანაცვლება $mnpq$ სიბრტყიდან თანდათანობით მცირდება და შეწყდება λ მანძილზე. მაგრამ, ვინაიდან $mnpq$ სიბრტყის ზემოთ და ქვემოთ მდებარე ატომებს შორის აღვილი აქვს ურთიერთქმედებას, კრისტალის ზედა ნაწილის

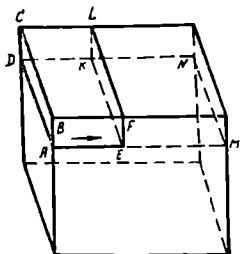


ნახ. 50.

ატომების ჰორიზონტალური მიმართულებით წანაცვლება გამოიწვევს კრისტალის ქვედა ნაწილის ატომების სათანადო წანაცვლებებს ამავე მიმართულებით. შედეგად ამისა, $abcd$ სიბრტყის ზევით 2λ სიგანის ზოლში გვექნება ატომების შემქვიდროება, ამ სიბრტყის ქვემოთ—გაჭიმვა. 2λ სიგანის ზოლის გარეთ $abcd$ სიბრტყის როგორც ზევით, ისე ქვევით, ატომები იმყოფებიან ძველი წონასწორობის მდგომარეობაში. ნახ. 50-ზე მოცემულია ატომების ორი ფენა $abcd$ სიბრტყის ზევით და ქვევით. აქ წერტილებით აღნიშნულია ატომების მდებარეობა წანაცვლებამდე და პატარა წრეებით—წანაცვლების შემდეგ. როგორც ამ ნახაზიდან ჩანს, მესერის დამახინჯება მოიცავს 2λ სიგანის ფენას m ხაზის გასწვრივ. ასეთი ტიპის დამახინჯებას კრისტალში უწოდებენ დისლოკაციას. m -ს ეწოდება დისლოკაციის ცენტრი. m -ს დისლოკაციის ხაზი, 2λ -ს დისლოკაციის

მეტი იმყოფებიან ძველი წონასწორობის მდგომარეობაში. ნახ. 50-ზე მოცემულია ატომების ორი ფენა $abcd$ სიბრტყის ზევით და ქვევით. აქ წერტილებით აღნიშნულია ატომების მდებარეობა წანაცვლებამდე და პატარა წრეებით—წანაცვლების შემდეგ. როგორც ამ ნახაზიდან ჩანს, მესერის დამახინჯება მოიცავს 2λ სიგანის ფენას m ხაზის გასწვრივ. ასეთი ტიპის დამახინჯებას კრისტალში უწოდებენ დისლოკაციას. m -ს ეწოდება დისლოკაციის ცენტრი. m -ს დისლოკაციის ხაზი, 2λ -ს დისლოკაციის

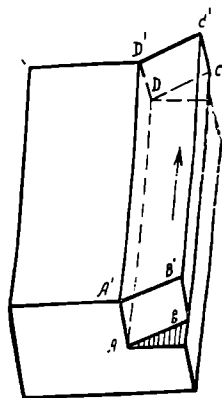
სიგანე და $abcd$ -ს სრიალის სიბრტყე. ვინაიდან 2λ რამდენიმე ატომური მანძილის რიგისაა, დისლოკაციის სიგანე შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ, ამიტომ ასეთ დისლოკაციას უწოდებენ ხაზოვანს. როგორც ვხედავთ, დისლოკაციის ხაზი მდებარეობს სრიალის სიბრტყეზე და წანაცვლების (ძვრის) მიმართულების მართობია, ანდა, როგორც ხშირად ამბობენ, დისლოკაციის ხაზი მართობია ბურგერის ვექტორისა (ეს უკანასკნელი განსაზღვრავს ძვრის მიმართულებას). ნახ. 51-ზე მოცემულია ხაზოვანი დისლოკაცია, რომელიც მიიღება კრისტალის ერთი ნაწილის $ABCDEF$ და KL -ს წანაცვლებით დანარჩენი ნაწილის მიმართ, მარჯვნიდან მარცხნივ ერთი ატომური მანძილით. ამ შემთხვევაში სრიალის სიბრტყეა $ADNM$,



ნახ. 51.

EK —დისლოკაციის ხაზი და AM —ძვრის მიმართულება (ბურგერის ვექტორის მიმართულება).

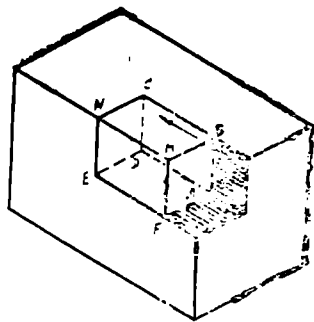
ნახ. 52-ზე მოცემულია ბრახნული დისლოკაცია, ამ შემთხვევაში კრისტალის ზედა ნაწილი $ABA'B'CDC'D'$ წანაცვლებულია BC ხაზის მიმართულებით ერთ ატომურ მანძილზე. $ABCD$ წარმოადგენს სრიალის სიბრტყეს, AD —ბრახნული დისლოკაციის ხაზს, იგი წარმოადგენს საზღვარს კრისტალის წანაცვლებულ და არაწანაცვლებულ ნაწილებს შორის. როგორც ნახაზიდან ჩანს, ხაზობრივი დისლოკაციისაგან განსხვავებით, აქ დისლოკაციის ხაზი პარალელურია ძვრის მიმართულებისა. ნახ. 53-ზე მოცემულია შემთხვევა, როდესაც დისლოკაცია შედგება ხაზოვანი და ბრახნული ნაწილებისაგან. აქ კრისტალის ნაწილი $ABMFCDEF$ წანაცვლებულია კრისტალის დანარჩენი ნაწილების მიმართ ერთ ატომურ მანძილზე. ამ შემთხვევაში AD წარმოადგენს ბრახნული დისლოკაციის ხაზს. იგი პარალელურია ძვრის მიმართულებისა (ბურგერის ვექტორისა). DC და DE წარმოადგენენ ხაზოვანი დისლოკაციის ხაზებს. ისინი მართობია ძვრის მიმართულებისა.



ნახ. 52.

ადვილი წარმოსადგენია, რომ ხაზოვანი დისლოკაცია არ შეიძლება თავდებოდეს კრისტალის შიგნით. იგი აუცილებლად უნდა გადადიოდეს

ხრახნულ დისლოკაციაში, ანდა იძლეოდეს შეკრულ წირს შემდგარს ხაზო-
ვანი და ხრახნული დისლოკაციებისაგან. ამრიგად, ჩვენ განვიხილეთ რამ-
დენიმე შემთხვევა, როდესაც დეფორმაციის შედეგად კრისტალში წარმო-
იშობიან ხაზოვანი ან ხრახნული დისლოკაციები. ბუნებრივია დავუშვათ,
რომ დისლოკაციების წარმოშობისა-
თვის ყველაზე ხელსაყრელ ადგი-
ლებს შეადგენენ ნაპრალები, რომ-
ლებიც საკმარისი რაოდენობით მოი-
პოვებიან ყოველ რეალურ კრისტა-
ლში. ცნობილია, რომ ნაპრალები
მასობრივად შინაგანი ძაბვები
დაახლოებით 1000-ჯერ აღემატებიან
შინაგან ძაბვებს კრისტალის არადა-
მასინჯებულ ნაწილებში. ამიტომ
ასეთ დიდ ძაბვებს ნაპრალების მა-
ხოლობლად ადვილად შეუძლიათ გა-
მოიწვიონ დისლოკაციების წარმო-

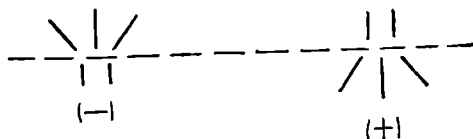


ნახ. 53.

შობა. ცდები გვიჩვენებენ აგრეთვე, რომ არადეფორმირებულ კრისტა-
ლებშიც გვაქვს დისლოკაციების გარკვეული რაოდენობა. ამ შემთხვევაში,
ცხადია, უნდა დავუშვათ, რომ დისლოკაციები ჩნდებიან თვით კრისტალის
ზრდის პროცესში. ასე მაგალითად, წარმოვიდგინოთ, რომ ადგილი აქვს
მეტალური ორთქლის კონდენსირებას მყარ ფაზაში. ატომების კონდენსი-
რების გზით შენდება ჯერ ერთი ატომური ფენა, შემდეგ მეორე და ა. შ.
მაგრამ ზრდის პროცესში რაღაც მიზეზების გამო შეიძლება რომელიმე
ატომური ფენის სრულ დამთავრებამდე დაიწყოს მორიგი ფენის შენება.
მაშინ დაუმთავრებელი ატომური ფენა აღმოჩნდება ორ მეზობელ ატო-
მურ ფენას შორის შეკუმშული, ისე როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 49-ზე.
დაუმთავრებელი ფენის ის ნაპირი, რომელიც მოთავსებულია კრისტალის
შიგნით, წარმოადგენს დისლოკაციის ხაზს. მას შეიძლება ჰქონდეს ნების-
მიერი ფორმა. კერძოდ იგი შეიძლება იყოს შეკრული წირი მოთავსებული
მთლიანად კრისტალის შიგნით.

ერთმანეთისაგან არჩევენ დადებით და უარყოფით დისლოკაციებს.
პირობით მიღებულია დისლოკაციას უწოდონ დადებითი, თუ სრიალის
ზედაპირის ზევით 2λ სიგანის ფენაში ატომები შეკუმშულია, ქვედა კი—
გაჭიმული და — უარყოფითი, თუ სრიალის ზედაპირის ზევით 2λ სიგანის
ფენაში ატომები გაჭიმულია, ქვევით—შეკუმშული (ნახ. 54). ადვილი
წარმოსადგენია, რომ თუ ერთი და იმავე სრიალის ზედაპირზე გვაქვს და-
დებითი და უარყოფითი დისლოკაციები, მათი შეხვედრისას, ისე როგორც
დადებითი და უარყოფითი ელექტრული მუხტები, ისინი ერთმანეთს სპო-
ბენ, რადგანაც ამ დროს აღდგება დამახინჯებანი სრიალის ზედაპირის

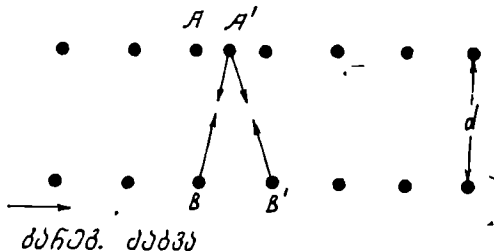
ორივე მხარეზე, გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ დადებითი და უარყოფითი დისლოკაციები მათ მიერ შექმნილი დაჭიმულობის ველით ისე მოქმედებენ ერთმანეთზე, როგორც დადებითი და უარყოფითი ელექტრული მუხტები. ასე მაგალითად: ერთნაირი ნიშნის დისლოკაციები ერთმანეთს განიზიდვენ, ხოლო სხვადასხვა ნიშნისა—იზიდვენ. ამასთან, დისლოკაციებს შორის



ნახ. 54.

ურთიერთქმედების ძალები უკუპროპორციულია მათ შორის მანძილის პირველი ხარისხისა, როგორც ამას ადგილი აქვს უსასრულო დამუხტული ძაფების შემთხვევაში. ამიტომ დისლოკაციის დაჭიმულობის ველი შეიძლება მივამსგავსოთ უსასრულო დამუხტული ძაფის ველს.

დისლოკაციის ძირითადი თვისებები. დისლოკაციის ძირითად თვისებას შეადგენს მისი ძვრადობა. ადვილად შეიძლება ვუჩვენოთ რომ დისლოკაციას გააჩნია მაღალი ძვრადობა მიკროსკოპულ დეფექტებთან შედარებით. ეს ფაქტი, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, მეტად მნიშვნელოვანია მთელი რიგი მოვლენების ასახსნელად, რომლებიც თანამედროვე პლასტიკური დეფორმაციის ფენომენოლოგიური თეორიის მიხედვით სრულიად გაუგებარია. იმისათვის, რომ ნათლად წარმოვიდგინოთ, თუ როგორ შეიძლება განხორციელდეს დისლოკაციის მაღალი ძვრადობა და ამავე დროს პლასტიკური დეფორმაცია მკირე მხებამბებზე, განვიხი-



ნახ. 55.

ლოთ ორი მეზობელ ატომთა ფენა, დაშორებული ერთმანეთისაგან d მანძილით (ნახ. 55). ვთქვათ, ქვედა რიგის ატომები უმოძრაოა, ხოლო ზედა რიგში პერიზონტალური მიმართულებით, მაგალითად, მარცხნიდან მარჯვნივ, მიყენებულია გარეგანი ძალა. გარკვეულ კრიტიკულ ძაბვაზე მიიღება პლასტიკური ძვრა ზედა ატომური სიბრტყისა ქვედას მიმართ.

აღნიშნული ძვრის მიმართ წინააღმდეგობას განსაზღვრავენ ზედა ფენის ატომების მიზიდულობით ქვედა ფენის ატომებთან. მაგრამ, ვინაიდან ატომებს შორის ურთიერთქმედების ძალები ძალიან სწრაფად ეცემათ, მათ შორის მანძილის გადიდებით, ამიტომ საკმარისი მიახლოებით შეიძლება შემოვისაზღვროთ უახლოესი ატომების ურთიერთქმედებით. ზედა ფენის ყოველი ატომი, მაგალითად A , ძირითადად ურთიერთქმედებს (იზიდავს) ქვედა ფენის B ატომთან. ზედა ფენის ატომების წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის მანძილის გადიდებით, ძვრის მიმართ წინააღმდეგობა თანდათანობით იზრდება, აღწევს მაქსიმუმს და შემდეგ ეცემა ნულამდე, როდესაც წანაცვლება გაუტოლდება $a/2$ -ს, სადაც a არის მეზობელ ატომებს შორის მანძილი. მართლაც, როდესაც ზედა ფენის ატომი A (ასევე დანარჩენი ატომებიც) მიიღებს A' მდებარეობას, მაშინ მის მიმართ ქვედა ფენის B და B' ატომებს ექნებათ სრულიად სიმეტრიული მდებარეობა, ამიტომ A' ნაწილაკზე (ასევე დანარჩენ ნაწილაკებზე) მოქმედი ტოლქმედი ძალის მდგენელი ძვრის მიმართულებით ნულის ტოლი იქნება. ადვილი წარმოსადგენია, რომ ზედა ფენის ატომების შემდგომ წანაცვლებას ხელს უწყობს ქვედა ფენის ატომების განლაგება, მანამ, სანამ წანაცვლება არ გაუტოლდება a -ს. ამის შემდეგ სურათი პერიოდულად მეორდება, რის შედეგად მიიღება წანაცვლება $a, 2a, 3a, \dots$ ა. შ. სიდიდეზე. მცირე დეფორმაციის შემთხვევაში სამართლიანია გუქის კანონი

$$\sigma = \frac{G \cdot x}{d}, \quad (5.8)$$

სადაც σ — მხები ძაბვა, G — ძვრის მოდული და x — წანაცვლების სიდიდე. სასრულო სიდიდის დეფორმაციის შემთხვევაში გარეგანი მხები ძაბვის ზემოთ აღწერილი სახის ცვლილება შეიძლება მიახლოებით მოცემული იქნეს შემდეგი ფუნქციით

$$\sigma = \frac{Ga}{2\pi d} \sin \frac{2\pi x}{a}, \quad (5.9)$$

რომელიც მცირე დეფორმაციის ($x \ll a$) შემთხვევაში გადადის გუქის კანონში. თანახმად (5.9) ფორმულისა, მხები ძაბვა აღწევს მაქსიმუმს როდესაც $x = a/4$ -ს და ნულს, როდესაც $x = a/2$. მხები ძაბვის მაქსიმალური მნიშვნელობა

$$\sigma_{max} = \frac{G \cdot a}{2\pi d} \simeq \frac{1}{2\pi} G. \quad (5.10)$$

ამ ფორმულით განისაზღვრება მხები ძაბვის თეორიული მნიშვნელობა პლასტიკური ძვრის მისაღებად. მაგრამ, ცდების თანახმად, მხები ძაბვის ის მნიშვნელობა, რომელიც ეთანადება პლასტიკურ ძვრას, სამი-ოთხი

რიგით ნაკლებია, ვიდრე ზემოთ მოცემული თეორიული მნიშვნელობა. ეს გარემოება, როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, გაუგებარია კრისტალთა პლასტიკური დეფორმაციის ფენომენოლოგიური თეორიის მიხედვით და მოითხოვს სათანადო ასსნას.

ახლა განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც სრიალის სიბრტყეზე მდებარეობს ერთი ხაზოვანი დისლოკაცია (ნახ. 50). m წერტილი წარმოადგენს ხაზოვანი დისლოკაციის ცენტრს, 2λ —დისლოკაციის სიგანეს. წერტილებით აღნიშნულია ატომების მდებარეობა მესერის დამახინჯებამდე, ხოლო პატარა წრეებით—დამახინჯების შემდეგ. m წერტილის მარცხენა მხარეზე მდებარე ატომები 1, 2, 3 ხელს უწყობენ, ხოლო მარჯვენა მხარეზე მდებარე ატომები 4, 5, 6 ეწინააღმდეგებიან ზედა სიბრტყის ძერას მარცხნიდან მარჯვნივ. გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ პირველ მიახლოებაში ძერის ხელშემწყობი ძალები აწონასწორებენ ძერის ხელშემშლელ ძალებს, ამიტომ 2λ სიგანის დამახინჯების (დისლოკაციის) წანაცვლებისათვის სჭირდება უმნიშვნელო მხების ძალა. თუ სრიალის ზედაპირზე გვაქვს 2λ სიგანის n დისლოკაცია, მაშინ ზედა და ქვედა სიბრტყეზე მდებარე ატომებს შორის მიზიდულობის ძალა შემცირებული იქნება $\frac{n\lambda}{s}$ სიდიდით, სადაც s არის

ზედა და ქვედა ატომური სიბრტყეების შეხების ფართი. ამრიგად, სრიალის სიბრტყეზე n დისლოკაციის არსებობის გამო მხები ძაბვის თეორიული მნიშვნელობა იქნება

$$\sigma_1 = \left(1 - \frac{n\lambda}{s} \right) \sigma, \quad (5.11)$$

სადაც σ არის მხები ძაბვის თეორიული მნიშვნელობა, როდესაც სრიალის სიბრტყეზე დისლოკაციები არა გვაქვს. ცდის თანახმად

$$\sigma_1/\sigma \sim 10^{-3} \div 10^{-4}.$$

ეს იმას, ნიშნავს რომ სრიალის ზედაპირის 99,9% უნდა შეიცავდეს დისლოკაციებს, ეს კი შეუძლებელია. მაშასადამე, ცდაზე დამზერილი პლასტიკური ძერა, რომელიც მიიღება ძალიან მცირე მხებ ძაბვაზე, აღარ აიხსნება სრიალის ზედაპირზე დისლოკაციების არსებობის გამო ზედა და ქვედა ფენის ატომებს შორის ურთიერთმიზიდულობის შემცირებით. როგორც ქვემოთ დავინახავთ, უმნიშვნელო მცირე მხებ ძაბვაზე პლასტიკური ძერის მიღება აიხსნება მხოლოდ დისლოკაციის მაღალი ძვრადობით. მართლაც, თანახმად ნახ. 50-ისა, დამახინჯებული ფენის (დისლოკაციის) პორიზონტალური მიმართულებით მარცხნიდან მარჯვნივ $\delta \ll a$ სიდიდეზე წანაცვლება გვაძლევს დისლოკაციის ცენტრის m -ის წანაცვლებას a სიდიდეზე და, მაშასადამე ასეთ სიდიდეზე მოხდება მაღლიანად დამახინჯებული არის (დისლოკაციის) წანაცვლება. ასეთ მცირე δ სიდიდეზე წანაცვლება

შეიძლება განხორციელდეს კრისტალის დეფორმაციის დროს და ასევე სითბური ფლუქტუაციის შედეგად. ეს გარემოება უზრუნველყოფს დისლოკაციის მაღალ ძვრადობას.

პლასტიკური ძვრის მექანიზმი. ვთქვათ, კრისტალი გარეგანი ძალების მოქმედებით იჭიმება $0-0$ მიმართულებით (ნახ. 47) და მივიღოთ, რომ სრიალის რომელიმე ზედაპირზე იმყოფება ერთი დადებითი დისლოკაცია, როდესაც შინაგანი მხები ძაბვა ზილწევს რაიმე კრიტიკულ მნიშვნელობას, დისლოკაცია დაიწყებს სრიალის ზედაპირზე მოძრაობას, მაგალითად მარცხნიდან მარჯვნივ, რაიმე სიჩქარით.

როდესაც დისლოკაცია გადავა კრისტალის მარჯვენა გვერდით ზედაპირზე, 2λ სიგანის შეკუმშული და გაჭიმული ფენები განთავსდებიან დაჭიმულობისაგან და მიიღებენ თავიანთ პირვანდელ დაუმახინჯებელ მდგომარეობას. ამ დროს შეკუმშული ნაწილი გაიშლება, გაჭიმული ნაწილი შემოკლდება ნორმალურ მდგომარეობამდე და შედეგად ამისა, მოხდება კრისტალის ზედა ნაწილის წანაცვლება ქვედა ნაწილის მიმართ α სიდიდებზე. თუ დავუშვებთ, რომ სრიალის ზედაპირზე მოთავსებულია მრავალი დადებითი დისლოკაცია, მაშინ გაჭიმვის დროს ისინი მიმდევრობით გამოვლენ კრისტალის მარჯვენა გვერდით ზედაპირზე და მოგვეცემენ ზედა ნაწილის წანაცვლებას ქვედა ნაწილის მიმართ მაკროსკოპულ სიდიდებზე, რომელიც დაიმზირება ცდაზე. ვთქვათ, სრიალის ზედაპირზე გვაქვს წყვილი (+) და (—) დისლოკაციები. თუ დავუშვებთ, რომ კრისტალის გაჭიმვის დროს ისინი იმოძრაებენ ერთმანეთის შესახვედრად, მაშინ მათი შეხვედრის ადგილზე გასწორდებიან შეკუმშული და გაჭიმული უბნები. სხვათაშორის რომ ვთქვათ, (+) და (—) დისლოკაციები ერთმანეთს მოსპობენ და ამრიგად გვერდით ზედაპირზე წანაცვლება არ მიიღება. მაგრამ თუ დავუშვებთ, რომ (+) დისლოკაცია გამოდის გვერდითი ზედაპირის ერთ მხარეს, ხოლო (—) დისლოკაცია მეორე მხარეს, მაშინ ისინი მოგვეცემენ გვერდითი ზედაპირის წანაცვლებას ერთი და იმავე მიმართულებით α მანძილზე. ცხადია, ასეთი მცირე სიდიდის წანაცვლება ცდაზე არ დაიმზირება. თუ დავუშვებთ, რომ ერთი და იგივე სრიალის ზედაპირზე გვაქვს დიდი რაოდენობით (+) და (—) დისლოკაციები, მაშინ კრისტალის გაჭიმულობის დროს ისინი კრისტალის შიგნითვე მოსპობენ ერთმანეთს და ცდაზე დამზერილი გვერდითი ზედაპირის წანაცვლებას ვერ უზრუნველყოფენ.

პრინციპულად შესაძლებელია მაკროსკოპული ძვრის მიღება ერთი დისლოკაციის საშუალებით. მართლაც, დავუშვათ, რომ (+) დისლოკაცია მხები ძაბვის მოქმედებით ლეზლობს ძალიან დიდ სიჩქარეს, მაშინ შესაძლებელია კრისტალის გვერდით ზედაპირზე გამოსვლის დროს ადგილი ექნეს შემდეგ გარემოებას: ძალიან დიდი კინეტიკური ენერგიის გამო 2λ—სიგანის დამახინჯებული ფენის შეკუმშული ნაწილი ინერციით შეიძ-

ლება გაიშალოს, ხოლო გაჭიმული ნაწილი—შეიკუმშოს ნორმაზე უფრო მეტად. შედეგად ამისა, კრისტალის მარჯვენა გვერდით ზედაპირზე მივიღებთ ძვრას α სიდიდეზე და ამავე ნაპირზე უარყოფითი დისლოკაცია წარმოიწობა. რომელიც მხევი ძაბვის მოქმედებით იმოძრაებს მარჯვნიდან მარცხნივ და კრისტალის მარჯვენა გვერდით ზედაპირზე გამოსვლისას მოგვეცემს იმავე მიმართულებით α სიდიდეზე ძვრას და ამავე ნაპირზე დადებითი დისლოკაციის წარმოიწობას, რომელიც იმოძრავეს მარჯვნივ და ზედაპირზე გამოსვლისას მოგვეცემს ამავე მიმართულებით α სიდიდეზე ძვრას და ამავე წახნაგზე (—) დისლოკაციის წარმოიწობას და ა. შ. ეს პროცესი განმეორდება მანამდე, სანამ დისლოკაციის კინეტიკური ენერგია არ შემცირდება იმდენად, რომ მას არ შეეძლება გვერდით ზედაპირზე გამოსვლისას ახალი დისლოკაციის წარმოიწობა. მეორე მხრივ, ცდები გვიჩვენებენ, რომ მხევი ძაბვის ის მნიშვნელობა, რომელზედაც მიიღება პლასტიკური ძვრა, დისლოკაციას ვერ ანიჭებს ისეთ კინეტიკურ ენერგიას, რომ განხორციელდეს ზემოთ აღწერილი ციკლი. ამიტომ გვჩნება ერთადერთი დაშვება, რომ სრიალის ზედაპირზე გვაქვს, ანდა დეფორმაციის

+	+	+	+	+
ξ				
—	—	—	—	—
+	+	+	+	+
—	—	—	—	—

ნახ. 56.

დროს წარმოიშობიან მრავალი ერთი და იგივე ნიშნის დისლოკაციები, რომელთა მიმდევრობითი გამოსვლა კრისტალის გვერდით ზედაპირზე გვაძლევს ცდაზე დამზერილ პლასტიკურ ძვრას. ამ შემთხვევაში გაუგებარი რჩება საკითხი, თუ რატომ არიან ერთმანეთისაგან დაშორებული წანაცვლების ზოლები 10^{-3} — 10^{-4} -სმ მანძილებით. ამ უკანასკნელის ასახსნელად ტეი-

ლორმა დაუშვა, რომ სრიალის ერთ ზედაპირზე გვაქვს ერთი ნიშნის დისლოკაციები, ხოლო მეორეზე—მეორე ნიშნისა (ნახ. 56), დამოუკიდებლად იმისა, დისლოკაციები წარმოიშობიან დეფორმაციის დროს თუ გვექონდა დეფორმაციამდე. ცდების თანახმად, დისლოკაციის სიმკვრივე (დისლოკაციის ზაზების რიცხვი, რომელიც მოდის დისლოკაციის ზაზის მართობი სიბრტყის 1 სმ² ზედაპირზე) არადამუშავებული კრისტალის შემთხვევაში შეადგენს 10^8 -ს, ხოლო ცივი დამუშავების შემთხვევაში— 10^{12} -ს. დისლოკაციის ასეთ სიმკვრივეს შეესაბამება დისლოკაციებს შორის საშუალო მანძილი $a \approx b = 10^{-3}$ — 10^{-4} სმ.

მაშასადამე, სრიალის სიბრტყეებს შორის მანძილი, რომელზედაც მიიღებინ პლასტიკური ძვრები, უნდა იყოს 10^{-3} — 10^{-4} სმ-ის რიგის, რასაც ცდა ადასტურებს.

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, დადებით ან უარყოფით დისლოკაციებს

შორის არსებობს ურთიერთმიზიდულობა, ამიტომ მხეები ძალის ის მნაშე-
ნელობა, რომელზედაც მიიღება პლასტიკური ძვრები, უნდა აღემატე-
ბოდეს (+) და (-) დისლოკაციებს შორის მიზიდულობის ძალას. ცივი
დამუშავების დროს, თანახმად ცდებისა, ადგილი აქვს სხეულის გამაგრე-
ბას, ე. ი. უფრო მეტ მხებ ძაბვაზე მიიღება პლასტიკური ძვრა, ვიდრე
არადამუშავებულ კრისტალში. ეს გარემოება ადვილად შეიძლება აიხსნას
დისლოკაციის თეორიით. მართლაც, ცივი დამუშავების დროს დისლოკა-
ციის სიმკვრივე იზრდება, ე. ი. მცირდება (+) და (-) დისლოკაციებს
შორის საშუალო მანძილი. შედეგად ამისა, გაიზრდება მათ შორის მიზი-
დულობის ძალა და მაშასადამე, გაიზრდება მხეები ძაბვის მნიშვნელო-
ბებიც.

გახსნილი ნივთიერებების ატომების თავმოყრა დის-
ლოკაციის ხაზის მახლობლად. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ,
დისლოკაცია ქმნის დაჭიმულობის ველს. ეს უკანასკნელი მოქმედებს გარ-
კვეული ძალით როგორც მეორე დისლოკაციაზე, ასევე ნებისმიერ სხვა
ტიპის დეფექტებზედაც. შედეგად ამისა, ადგილი აქვს გახსნილი ნივთიე-
რების ატომების თავმოყრას დისლოკაციის ხაზის მახლობლად. გახსნილი
ნივთიერების ატომებს შეიძლება ჰქონდეს ჩანაცვლების (გახსნილი ნივთიე-
რების ატომები იკავებენ კრისტალის რეგულარული ატომების კვანძურ-
ტილებს) ანდა, ჩანერგვის ხასიათი. გახსნილი ნივთიერების ატომები იკა-
ვებენ კვანძთა შორის ადგილებს. ჩანაცვლების შემთხვევაში, დიდი ზომის
ატომები თავს იყრიან დამახინჯებული ფენის გაჭიმულ, ხოლო მცირე
ზომის ატომები — შეკუმშული ფენის ნაწილებში. ამრიგად დისლოკაციის
ხაზის მახლობლად წარმოიჭობა ატმოსფერო გახსნილი ნივთიერების ატო-
მებისა, რომელთა კონცენტრაცია მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$C = C_0 e^{-V/kT}, \quad (5.12)$$

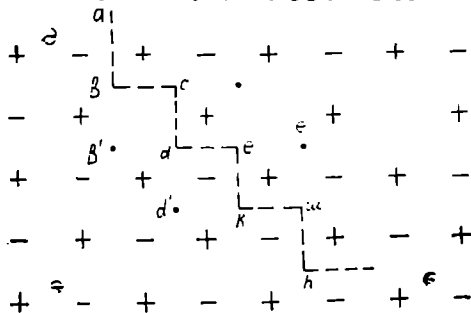
სადაც V არის ურთიერთქმედების ენერგია გახსნილი ნივთიერების ატო-
მებისა დისლოკაციასთან. კრისტალის მცირე დეფორმაციის შემთხვევაში
დისლოკაცია მოძრაობს მცირე სიჩქარით თავისი ატმოსფეროთი. ცხადია,
ატმოსფერო გახსნილი ნივთიერებისა ამცირებს (ამუხრუჭებს) დისლოკა-
ციის სიჩქარეს. მიიღება ნელი დეფორმაცია. სწრაფი დეფორმაციის მი-
საღებად საჭიროა დისლოკაციას მოვაცილოთ ატმოსფერო გარეგანი ძალის
მიყენებით, რომელიც აღემატება მიზიდვის ძალას გახსნილი ნივთიერების
ატომებისა დისლოკაციასთან. ამ დროს დისლოკაცია იმოძრაავს აჩქარე-
ბულად, რის შედეგად მიიღება სწრაფი დეფორმაცია შედარებით ნაკლებ
ძალაზე. ეს გარემოება ადვილად ხსნის მკვეთრი დენადობის მოვლენას,
რომელიც დამახასიათებელია განსაკუთრებით რკინისათვის და რბილი
ფოლადისათვის. ზემოთ მოყვანილი გარემოება ადვილად ხსნის დეფორ-

მირებული რკინის დაბერებას და აგრეთვე სხვა მოვლენებსაც, რომელზედაც ჩვენ აქ არ შეეჩერდებით.

დისლოკაცია, როგორც წყარო, დადებითი და უარყოფითი ვაკანსიებისა. როგორც ცნობილია, ტუტე-პალოიდური კრისტალების ელექტრული და ოპტიკური თვისებები ძირითადად განისაზღვრებიან მიკროსკოპული დეფექტების რიცხვით, როგორიცაა: დადებითი და უარყოფითი ვაკანსიები, კვანძთა შორის ატომები, შეღებვის ცენტრები და სხვა. მათი წონასწორული რიცხვი მოიცემა ბოლცმანის კანონით.

$$n = N e^{-E/kT}. \quad (5.13)$$

სადაც N არის მესერის კვანძების საერთო რიცხვი E —დეფექტის გაჩენის ენერგია. ტუტე-პალოიდურ კრისტალებში E რამდენიმე ელექტრონ-ვოლტის რიგისაა, ამიტომ დეფექტების რიცხვი, ჩვეულებრივ ტემპერატურაზე, განსაკუთრებით დაბალ ტემპერატურებზე, თანახმად (5.13) ფორმულისა, ძალიან მცირეა და არ ეთანადება დეფექტების იმ რაოდენობას, რომელიც საჭიროა ექსპერიმენტული ფაქტების ასახსნელად.



ნახ. 57.

დისლოკაცია, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, ქმნის დეფექტების წარმოშობის ბევრად უფრო ხელსაყრელ პირობებს, რის შედეგად, დეფექტების წონასწორული რიცხვი, მიღებული დისლოკაციისაგან, შეიძლება რამდენიმე რიგით აღემატებოდეს (5.13) ფორმულით მოცემულ მნიშვნელობას. ამის საილუსტრაციოდ განვიხილოთ იონური კრისტალი, რომელიც შეიცავს, მაგალითად, ხაზოვან დისლოკაციას. ნახ. 57-ზე წირი $abcd$ არის დისლოკაციის ხაზი. ყველაზე უფრო ალბათურია დავუშვათ, რომ დისლოკაციის ხაზი შედგება ტეხილი ხაზებისაგან, რომლის წვეროებზე მოთავსებულია მესერის (+) და (—) იონები. ზეიტცმა მარტივი მსჯელობით გვიჩვენა, რომ დისლოკაციის ხაზის b , c , d , e წვეროებთან მდებარე იონები ქმნიან პოტენციალურ ორმოებს b' , c' , d' და

ა. შ. წერტილებში, რომლებსაც ეთანადება ეფექტური მუხტი $\pm e/2$, სადაც e არის იონის მუხტი. ამის დასამტკიცებლად, ზეიტცი შემდეგნაირად მსჯელობს: ვთქვათ x' წერტილს ეთანადება რაღაც ეფექტური მუხტი q . როდესაც მესერის რეგულარული უარყოფითი იონი გადავა x' წერტილში, მაშინ დისლოკაციის ხაზი გადაიწევა x წერტილიდან x' -ში, ისე როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 57-ზე პუნქტირით. მაშინ x' წერტილის ქვემოთ x'' წერტილში შეიქმნება პოტენციალური ორმო, რომელსაც ეთანადება ეფექტური მუხტი q . ამრიგად:

$$q + e = -q,$$

აქედან

$$q = -e/2, \quad (5.13)$$

მაშასადამე, თუ დისლოკაციის ხაზის რომელიმე წვეროსთან მდებარეობს დადებითი იონი, იგი კვანძთა შორის სივრცეში ქმნის პოტენციალურ ორმოს, რომელსაც ეთანადება უარყოფითი ეფექტური მუხტი სიდიდით $e/2$. ასევე, თუ დისლოკაციის ხაზის წვეროსთან მდებარეობს უარყოფითი იონი, იგი ქმნის კვანძთა შორის სივრცეში პოტენციალურ ორმოს, რომელსაც ეთანადება დადებითი ეფექტური მუხტი სიდიდით $e/2$. ადვილი გასაგებია, რომ ასეთ პოტენციალურ ორმოებში მესერის რეგულარული იონის გადასვლას დასჭირდება ნაკლები ენერგია, ვიდრე დისლოკაციის ხაზიდან მოშორებით მდებარე კვანძთა შორის სივრცეში. მესერის დადებითი და უარყოფითი იონები, გადავლენ რა აღნიშნულ პოტენციალურ ორმოებში, თავის ადგილებზე დატოვებენ (+) ანდა (—) ვაკანსიებს, რომლებიც შემდეგ დიფუზიონირებიან კრისტალის მოცულობაში. სხვანაირად რომ ვთქვათ, პოტენციალური ორმოები წარმოადგენენ (+) და (—) ვაკანსიების წყაროებს. შესაძლებელია აგრეთვე შებრუნებული პროცესაც. კრისტალის მოცულობაში მოხვითალე (+) ან (—) ვაკანსიები შეიძლება ჩაქერილ იქნას დისლოკაციის ხაზის წვეროებთან მოთავსებული დადებითი ან უარყოფითი იონის მიერ. ამ შემთხვევაში ვაკანსიების გარკვეული რაოდენობა გაქრება, სამაგიეროდ, დისლოკაციის ხაზი ამ ადგილებში გადაიწევა გარკვეულ მანძილზე ზევით ან ქვევით. ამრიგად, ყოველ მოცემულ ტემპერატურაზე, ამ ორი საწინააღმდეგო მიმართულების პროცესებს შორის დამყარდება წონასწორობა. მას შეესაბამება დეფექტების (ვაკანსიების) გარკვეული წონასწოვრული კონცენტრაცია, რომელიც მოიცემა ისევ ბოლცმანის კანონით

$$n \sim e^{-E/kT}, \quad (5.14)$$

სადაც E არის ენერგიის ის რაოდენობა, რომელიც საჭიროა რეგულარული იონის გადასაყვანად ზემოთ აღნიშნულ პოტენციალურ ორმოში. ცხადია, ეს ენერგია ბევრად ნაკლებია, ვიდრე ენერგიის ის რაოდენობა,

რამელიც საჭიროა იონის გადასაყვანად კვანძთა შორის სივრცეში. ამიტომ ვაკანსიების წარმოშობა დისლოკაციების საშუალებით ბევრად უფრო ეფექტურია, მაგრამ მათი თეორიული გათვლა დაკავშირებულია დიდ სიძნელეებთან, რადგანაც არ ვიცით დისლოკაციების განაწილება დისლოკაციის ზაზის სიდიდის მიხედვით. მაგრამ, თუ დავუშვებთ, რომ მათი განაწილება ემორჩილება შემთხვევით კანონს, მაშინ დეფექტების რიცხვი გამოძვლილი დისლოკაციური მექანიზმით, რამდენიმე რიგით აღემატება 5.13) ფორმულით მოცემულ დეფექტების რიცხვს. ეს გარემოება შეიძლება გამოყენებული იქნეს იმისათვის, რომ დისლოკაციები უფრო ფართოდ დაუკავშირონ სხეულის ელექტრულ და ოპტიკურ თვისებებს, რომელთა განხილვა დიდ ღროს მოითხოვს, ამიტომ ამ საკითხზე აქ არ შეეჩერდებით.

დენის მატარებელთა წონასწორობი კონსენტრაცია ნახევარგამტარებში

§ 1. საკუთარი და მინარეზული გამტარებლობა

კრისტალურ სხეულებს, მათი ელექტრული თვისებების მიხედვით, ჩვეულებრივ სამ ჯგუფად ყოფენ: მეტალებად, ნახევარგამტარებად და დიელექტრიკებად. მათ შორის გარკვეული საზღვრების გატარება შეუძლებელია, ამიტომ პირობით მიღებულია:

$\sigma > 10^4 \Omega^{-1} \text{ სმ}^{-1}$ — მეტალებისათვის

$\sigma < 10^{-10}$ „ „ — დიელექტრიკებისათვის

$\sigma = 10^4 \div 10^{-10}$ „ „ — ნახევარგამტარებისათვის

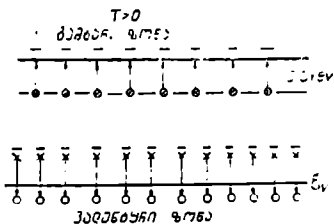
სადაც σ არის სხეულის ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტი. ზოგიერთ პირობებში (გაშუქების, ანდა დიდი ენერგიის მქონე ნაწილაკების დაშლის დროს) დიელექტრიკებისა და ნახევარგამტარების ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტები შეიძლება იმდენად გაიზარდოს, რომ არსებითად შეიცვალოს მათი ცვლილებების საზღვრები, რომელიც მოცემული იყო ზემოთ. ამიტომ სხეულების დაყოფას მათი ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტის სიდიდის მიხედვით არავითარი დასაბუთება არა აქვს. მყარი სხეულის ზონური თეორია იძლევა ფიზიკურად დასაბუთებულ დაყოფას სხეულებისა ორ ჯგუფად: მეტალებად და არამეტალებად (თავი IV., § 8). თუ ზონა ნაწილობრივ შევსებულია ელექტრონებით, სხეულები მეტალებია. თუ $T=0$ ტემპერატურაზე ვალენტური ზონა მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით და მისგან გარკვეული სიდიდით დაშორებული აკრძალული ზონა ცარიელია ელექტრონებისაგან — სხეულები არამეტალებია. აკრძალული ზონის სიდიდის მიხედვით არამეტალები ფორმალურად იყოფიან ნახევარგამტარებად ($E_g < 2\text{eV}$) და დიელექტრიკებად ($E_g > 2\text{eV}$). არამეტალურ სხეულებში $T > 0$ ტემპერატურაზე სითბური ფლუქტუაციის შედეგად ელექტრონები გადადიან ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში და ნიმუშს ანიჭებენ ელექტრონულ, ხოლო ვალენტურ ზონაში გა-

ჩენილი ხერხელები—ხერხეულერ გამტარებლობას. ამიტომ სრული გამტარებლობა წარმოადგენს ელექტრონულ და ხერხეულერ გამტარებლობათა ჯამს. სხეულის ამ გამტარებლობას უწოდებენ საკუთარს. როგორც ჭვემოთ დაეინახავთ, სხეულის საკუთარი გამტარებლობა ტემპერატურის გაღიდებით იზრდება ექსპონენციალური კანონით. ნახვეარგამტარების ფიზიკური თვისებები (ელექტრული, ოპტიკური, მაგნიტური და სხვა) მეტად მგრძნობიარე არიან გარეშე ფაქტორების (ტემპერატურის, გაშუქების, წნევის და სხვ.) უმნიშვნელო ცვლილებების მიმართ. მაშინ როდესაც მეტალები-სათვის გარეშე ფაქტორების გავლენა უმნიშვნელოა. ეს გარემოება, როგორც შემდეგში გამოირკვა, დაკავშირებულია მინარეგებთან. ყოველი რეალური სხეული მინარეგების სახით შეიცავს სხვადასხვა ნივთიერების ატომების გარკვეულ რაოდენობას, რომლებიც, ცხადია, ამახინჯებენ მესერის პერიოდულ ველს. შრედინგერის სათანადო განტოლების (დამახინჯებული პერიოდული ველით) ამოხსნა გვიჩვენებს, რომ მინარევი ატომების ენერგეტიკული დონე მდებარეობს აკრძალული ზონის შიგნით. ზოგიერთი მინარევი ატომის ენერგეტიკული დონეები მდებარეობს გამტარებლობის ზონის ჭვედა ნაპირის მახლობლად და შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე ხდება მათი სავალენტო ელექტრონების იონიზაცია—გადასვლა გამტარებლობის ზონაში და ამრიგად, სხეულს ანიჭებენ დამატებით ელექტრონულ გამტარებლობას. ასეთ ატომებს უწოდებენ დონორებს. საჭიროა აღინიშნოს შემდეგი გარემოება: დონორის დონიდან გამტარებლობის ზონაში გადასული ელექტრონი დონორის დონეზე ტოვებს ხერხელს, რომელიც ლოკალიზებულია აღებულ დონორთან, ამიტომ გამტარებლობაში მონაწილეობას არ ღებულობს. ზოგიერთი მინარევი ატომის ენერგიის დონეები მდებარეობენ ვალენტური ზონის ზედა ნაპირის მახლობლად და შედარებით დაბალ ტემპერატურაზე იერთებენ ელექტრონს ვალენტური ზონიდან, ამიტომ ვალენტურ ზონაში გაჩენილი ხერხელები სხეულს ანიჭებენ დამატებით ხერხეულერ გამტარებლობას. ასეთი ტიპის მინარეგებს აქცეპტორებს უწოდებენ. აქცეპტორებზე ჩაჭერილი ელექტრონები ლოკალიზებული არიან აღებულ აქცეპტორებთან, ამიტომ ისინი გამტარებლობაში მონაწილეობას არ ღებულობენ. საზოგადოდ დონორებისა და აქცეპტორების კონცენტრაცია რაოდენიმე რიგით ნაკლებია კრისტალის რეგულარული ატომების კონცენტრაციასთან შედარებით. ამიტომ მეტალების შემთხვევაში, სადაც თავისუფალი ელექტრონების რაცხვი რეგულარული ატომების რიგისაა, დონორებისა და აქცეპტორების მიერ გამოწვეული გამტარებლობა შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ. ხოლო რაც შეეხება არამეტალებს—ნახვეარგამტარებს, სადაც საკუთარი გამტარებლობა მკვეთრად იცვლება ტემპერატურის მიხედვით, ყოველთვის შეიძლება ვუჩვენოთ ტემპერატურის ის არე, როლის ზევით არსებითია საკუთარი გამტარებლობა და მხედველობაში არ მივიღოთ მინარეგებით გამოწვეული დამატე-

ბითი გამტარებლობა. ასევე შეიძლება ვუჩვენოთ ტემპერატურის ის არე, რომლის ქვემოთ არსებითია მინარევული გატარებლობა და მხედველობაში არ მივიღოთ საკუთარი გამტარებლობა. თუ ტემპერატურის მოცემულ არეში არსებითია მინარევული გამტარებლობა, მაშინ დონორების შემცველ კრისტალებს უწოდებენ n ტიპის ნახევარგამტარებს, ხოლო აქცეპტორების შემცველ კრისტალებს p ტიპის ნახევარგამტარებს. ნახ. 58ა-ში ნაჩვენებია დონორებისა და აქცეპტორების ენერგეტიკული სურათი.

$T=0$ ტემპერატურაზე საკუთარი გამტარებლობა არა გვაქვს. ამავე დროს არც ერთი დონორი და აქცეპტორი იონიზირებული არ არის. ამიტომ სხეული აბსოლუტურ იზოლიატორს წარმოადგენს.

$T>0$ ტემპერატურაზე დონორების ნაწილი იონიზირებულია, ე. ი. მათი სავალენტო ელექტრონები გადასულია გამტარებლობის ზონაში. ასევე აქცეპტორების ნაწილი იონიზირებულია, ე. ი. ზოგიერთ აქცეპტორზე ჩაჭერილია ელექტრონები



ნახ. 58 ბ.

შემთხვევა: 1) როდესაც მინარევების სრულ გამოფიტვამდე (ანდა სრულ იონიზაციამდე) შემოდის საკუთარი გამტარებლობა, ამ დროს სხეულის გამტარებლობა მუდამ იზრდება ტემპერატურის გადიდებით, რაც დამახასიათებელია ნახევარგამტარებისათვის და 2) მინარევები მთლიანად გამოფიტულია (იონიზირებულია), მაგრამ საკუთარი გამტარებლობა კიდევ უმნიშვნელოა, მაშინ გარკვეულ საზღვრამდე ტემპერატურის გადიდებით გამტარებლობა ეცემა, ისე როგორც მეტალებისათვის, გარკვეული ტემპერატურის ზევით არსებითი გახდება საკუთარი გამტარებლობა, ამიტომ ტემპერატურის შემდგომი გადიდებისას გამტარებლობა ისევ გაიზრდება. ეს შემთხვევები ნაჩვენებია ნახ. 59-ზე.

$T=0$
გამტარებლობის ზონა

x x x x x x x x x x 0.157777

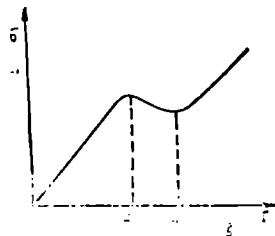
x x x x x x x x x x 0.157777

მინარევი ზონა

ნახ. 58 ა.

ვალენტური ზონიდან (ნახ. 58ბ). ცხადია, რომ დაბალ ტემპერატურაზე არსებითია მინარევული გამტარებლობა, მაღალ ტემპერატურაზე კი—საკუთარი. ტემპერატურის ის არე, რომლის ზემოთ არსებითია საკუთარი გამტარებლობა, დამოკიდებულია აკრძალული ზონის E_g სიგანეზე, მინარევების ენერგეტიკულ დონეებზე და მათ კონცენტრაციაზე. აქ შესაძლებელია ორი

ხემათ თქმულის საფუძველზე ნახ. 59-ში AA' ინტერვალში ნახევარგამტარების ყოფაქცევა ტემპერატურის მიხედვით ისეთია, როგორც მეტალებისათვის, ამიტომ იმის გასაგებად, რომ მოცემული კრისტალი მეტალია თუ არამეტალი, საჭიროა ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტის გაზომვა ტემპერატურის საკმარისად დიდ ინტერვალში დაწყებული დაბლიდან საკმარისად მაღალ ტემპერატურამდე.



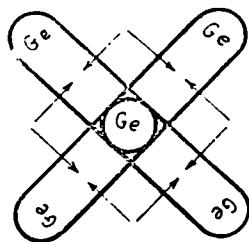
ნახ. 59.

§ 2. II და II ტიპის ნახევარგამტარების მიღება

ამჟამად ყველაზე უფრო კარგად არის შესწავლილი და დამუშავებული Ge და Si-ს სუფთა კრისტალების მიღების ტექნოლოგია და მათი ფიზიკური თვისებები, რის გამოც აღნიშნულმა კრისტალებმა მრავალი პრაქტიკული გამოყენება მიიღეს. ამიტომ, უპირველეს ყოვლისა, დავიწყებთ ამ კრისტალების განხილვას.

Ge და Si ოთხვალენტიანი ელემენტებია. ისინი კრისტალდებიან ალმასის ტიპის მესერში. ეს უკანასკნელი წარმოადგენს ორ წანაგვერტირებულ კუბურ მესერთა ერთობლიობას. ამასთან, ერთი მესერი მეორის მიმართ წანაცვლებულია კუბის (ელემენტარული კუბის) სივრცითი დიაგონალის ერთ მეოთხედ სიდიდეზე ამ დიაგონალის გასწვრივ. ელემენტარულ უჯრედს შეადგენს რომბოედრი. აქ ყოველი ატომი გარშემორტყმულია ასეთივე ოთხი ატომით და ცენტრალური ატომიდან დაშორებული არიან ტოლი მანძილებით, მათი პროექცია სიბრტყეზე ნაჩვენებია ნახ. 60.

ატომებს შორის ბმა ვალენტურია, რომლებსაც ანხორციელებენ თითო ატომიდან თითო ელექტრონი საწინააღმდეგო სპინებით. Ge და Si-ში ვალენტური ბმები მთლიანად გაჯერებულია. ნახ. 60-ზე ისრებით არის ნაჩვენები ყოველ ორ ატომს შორის ბმები, რომლებსაც ანხორციელებს ელექტრონთა წყვილი საწინააღმდეგო სპინებით.

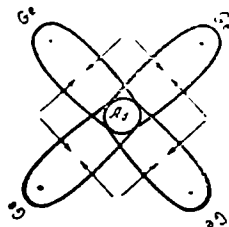


ნახ. 60.

უთქვამთ, Ge ან Si-ში შეტანილია მინარეგების სახით ზუთვალენტიანი ელემენტების ატომები: (P, As, Se), მაგ. As-ის ატომები. თანახმად ცდებისა, As-ს ატომები Ge ან Si-ში ჩანაცვლებითია, ე. ი. ისინი იკავებენ მესერის კვანძურტილებს, სადაც აკლიათ Ge ან Si ატომები, As-ს ატომის

ოთხი სავალენტო ელექტრონი გვაძლევს ნაჯერ ვალენტურ ბმას Ge ან Si-ს ოთხ მეზობელ ატომთან, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 61ა-ზე ისრებით. As-ს მეხუთე სავალენტო ელექტრონი კი რჩება ვალენტური ბმის გარეშე. იგი ამგვარად მოძრაობს As-ს ატომის ნაშთის ველში, რომლის ეფექტური მუხტი უდრის $+e$ და ქმნის კულონურ ველს, რომლის სილიდე შემცირებულია გარემოს დიელექტრიკული მუდმივით (ϵ -ით), ე. ი.

$$u(r) = \frac{e^2}{\epsilon r}.$$



ნ. ხ. 61 ა.

ამ შემთხვევაში (4.80) განტოლება დაიყვანება წყალბადის ატომის პრობლემაზე, რომლის ენერგეტიკული სპექტრი ცნობილია. წყალბადის ატომის იონიზაციის ენერგია გამოისახება შემდეგი ფორმულით:

$$W = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,5\text{eV}, \quad (6.1)$$

სადაც m არის ელექტრონის ნამდვილი მასა, როდესაც ვიხილავთ ელექტრონს კრისტალში ეფექტური მასის მიახლოებაში, ელექტრონის ნამდვილი მასა უნდა შევცვალოთ ეფექტური მასით m^* . გარდა ამისა, რადგანაც As-ს მეხუთე სავალენტო ელექტრონი იმყოფება დიელექტრიკულ გარემოში, მისი იონიზაციის ენერგია შემცირებული იქნება ϵ^2 -ით. სადაც ϵ არის კრისტალის დიელექტრიკული მუდმივა. მართლაც, კულონის კანონის თანახმად, ორი ელექტრული მუხტის ურთიერთქმედების ენერგია სივრცითი ველის უდრის e^2/r -ს.

სივრცითიდან დიელექტრიკულ გარემოში გადასვლისას $e^2 \rightarrow e^2/\epsilon$. ვინაიდან წყალბადის ატომის იონიზაციის ენერგია პროპორციულია e^4 -ს, ამიტომ დიელექტრიკულ გარემოში გადასვლისას $e^4 \rightarrow e^4/\epsilon^2$ -ით. ამრიგად, As-ის ატომის მეხუთე სავალენტო ელექტრონის იონიზაციის ენერგიისათვის მივიღებთ

$$W = \frac{m^*e^4}{2\hbar^2\epsilon^2} = \frac{1}{\epsilon^2} \cdot \frac{m^*}{m} \cdot 13,5\text{eV} \quad (6.2)$$

წყალბადის ატომის შემთხვევაში ელექტრონის ძირითადი ორბიტის რადიუსი

$$r = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,5\text{\AA}. \quad (6.3)$$

As-ს ატომის მეხუთე სავალენტო ელექტრონისათვის გვექნება

$$r = \frac{\chi \cdot h_2}{m^* e^2} = \chi \cdot \frac{m}{m^*} \cdot 0,5 \text{ \AA}. \quad (6.4)$$

$\frac{m^*}{m}$ შეფარდება შეიძლება აღებული იქნეს ციკლოტრონული რეზონანსის ცდებიდან, ხოლო რაც შეეხება დიელექტრიკულ მუდმივას Ge-თვის, $\chi = 16$ და Si-თვის $\chi = 12$. ამ სიდიდეების ჩასმა (6.2) ფორმულაში იონიზაციის ენერგიისათვის გვაძლევს:

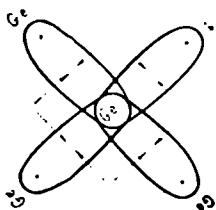
$$W \simeq 0,01 \text{ eV Ge-თვის,}$$

$$W \simeq 0,045 \text{ eV Si-თვის.}$$

შემდეგში ამ სიდიდეებს აღნიშნავთ E_d E_d -თი. ეს წარმოადგენს მანძილს მინარევის დონიდან გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირამდე.

თანახმად (6.4) ფორმულისა, As-ს მეხუთე სავალენტო ელექტრონის რადიუსი ბევრად აღემატება Ge და Si მესერში მეზობელ ატომებს შორის მანძილს.

$T = 0$ ტემპერატურაზე მინარევის მეხუთე სავალენტო ელექტრონი ლოკალიზებულია As-ს ატომთან. ზონური სურათის მიხედვით, ელექტრონი მოთავსებულია აკრძალულ ზონაში დონორის დონეზე. $T > 0$ ტემპერატურაზე იონიზაციის ენერგიის სიმცირის გამო ეს ელექტრონი აღვილად წყდება As-ს ატომს და გადადის გამტარებლობის ზონაში. მაშასადამე, Ge და Si-ში შეტანილი ხუთვალენტიანი ატომები დონორებს შეადგენენ.



ნახ. 61 ბ.

ე. ი. სათანადო ნახევარგამტარები n ტიპისა (n —Ge და n —Si).

განვიხილოთ ახლა Ge და Si-ში მინარევები სამვალენტო ელემენტებისა (B, Al, Ga, In...). მაგალითად, Ga-ის ატომები. ცდები გვიჩვენებენ, რომ ეს მინარევები აგრეთვე ჩანაცვლებითია (ნახ. 61ბ). ვინაიდან Ga-ის ატომი სამვალენტ-

ტიანია, მეზობელ ოთხ Ge ან Si ატომებთან ნაჭერი ვალენტური ბმის მისაღებად აკლია ერთი ელექტრონი, ამიტომ Ga-ის ატომი ერთ ელექტრონს ართმევს მესერის რეგულარულ ატომს (ცხადია $T > 0$ ტემპერატურაზე) და მეზობელ ოთხ Ge და Si ატომებთან ადგენს ნაჭერ ვალენტურ ბმას. ზონური სურათის მიხედვით, ეს ნიშნავს იმას, რომ ატომი იღებს ერთ ელექტრონს ვალენტური ზონიდან, ამიტომ ვალენტურ ზონაში ჩნდება ზერელი, რომელიც კრისტალს ანიჭებს ზერელურ გამტარებლობას.

$T = 0$ ტემპერატურაზე მინარევეული Ga-ის ატომს აკლია ერთი ელექტ-

რონი მეზობელ ოთხ ატომთან ნაჯერი ბმის მისაღებად. სხვანაირად რომ ვთქვათ, $T=0$ ტემპერატურაზე C_{60} -ის ატომთან ლოკალიზებულია ზერელი, რომლის იონიზაციის ენერგია, ეფექტური მასის მიახლოებაში, თუ ვისარგებლებთ წყალბადის ატომის მოდელით, აგრეთვე ტოლია $E_d \approx 0,01 \text{ eV}$. $T>0$ ტემპერატურაზე ეს ზერელი ადვილად შეიძლება მოწყდეს C_{60} -ატომის ნაშთს, რომელიც ხასიათდება— e ეფექტური მუხტით და გადავიდეს ვალენტურ ზონაში, რომელიც კრისტალს ანიჭებს ზერელურ გამტარებლობას. საჭიროა აღინიშნოს ის გარემოება, რომ C_{60} -ის ატომიდან ზერელის გადასვლა ვალენტურ ზონაში ნიშნავს ელექტრონის ჩაქერას ვალენტური ზონიდან. მაშასადამე, სამვალენტიანი ატომები Ge და Si -ში წარმოადგენს აქცეპტორებს, რომელთა იონიზაციის ენერგია ეფექტური მასის მიახლოებაში უდრის $0,01 \text{ eV}$ და $0,045 \text{ eV}$ სათანადოდ Ge და Si -ში.

ცდების თანახმად, დონორებისა და აქცეპტორების იონიზაციის ენერგია მათ კონცენტრაციაზე არ არის დამოკიდებული, სანამ კონცენტრაცია $< 10^{18} / \text{სმ}^3$. როცა ეს მინარევების კონცენტრაცია აღემატება $> 10^{18} / \text{სმ}^3$, მაშინ იონიზაციის ენერგია კონცენტრაციაზე დამოკიდებული ხდება. ეს დამოკიდებულება დადგენილ იქნა ემპირიული გზით

$$E_d = E_d^0 - \alpha_d \cdot N_d^{1/3} \quad (6.5)$$

$$E_a = E_a^0 - \alpha_A \cdot N_A^{1/3},$$

სადაც N_d და N_A არის კონცენტრაცია დონორებისა და აქცეპტორების სათანადოდ, α_d და α_A რიცხვითი კოეფიციენტებია, რომელთა მნიშვნელობა შეიძლება დადგენილ იქნეს მხოლოდ ცდით. ამასთან, ეს კოეფიციენტები ისეა შერჩეული, რომ როცა კონცენტრაცია $\geq 10^{18} / \text{სმ}^3$, იონიზაციის ენერგია შეიძლება ნულის ტოლი გახდეს, რადგანაც ასეთ კონცენტრაციაზე ნიმუში თითქმის მეტალი ხდება.

განვიხილოთ ახლა ორი და ექვსვალენტიანი ატომების მინარევები Ge და Si -ში. ექვსვალენტიანი ატომები Ge და Si -ში დონორებია. ექვსი სავალენტო ელექტრონიდან ოთხი მოდის ვალენტური ნაჯერი ბმის შესაღებად ოთხ უახლოეს მეზობელ C_{60} ან Si -ს ატომებთან. დანარჩენი ორი სავალენტო ელექტრონი რჩება ვალენტური ბმის გარეშე, ისინი იმყოფებიან მინარევი ატომის ნაშთის ველში, რომელსაც ეთანადება $+2e$ ეფექტური მუხტი. ამიტომ ბმა უფრო ძლიერია, ვიდრე ხუთვალენტიანი ატომის შემთხვევაში. თუმცა, ამ შემთხვევაში ეფექტური მასის მიახლოება კარგი არ არის. შეიძლება ვთქვათ, რომ ისინი უფრო ღრმა დონეებს იძლევიან, ვიდრე ხუთვალენტიანი ატომები. ასევე ორვალენტიანი ატომები Ge და Si -ში გვაძლევენ ღრმა აქცეპტორულ დონეებს. ღრმა დონორული და აქცეპტორული დონეები ნაკლებ როლს ასრულებენ დენის გადამტან ნაწილაკთა შექმნაში. ისინი, პირიქით, წარმოადგენენ ელექტრონების ან

ხერელების ჩამკერ ცენტრებს, ამიტომ ასეთი ღონეები დენის ძალის სი-
დიდეს ამცირებენ. ორ და ექვსვალენტიანი ატომების მიერ შექმნილი
ღრმა დონორული და აქცეპტორული ღონეები არსებით როლს ასრულებ-
ენ რეკომბინაციის საკითხებში, რომელსაც ჩვენ ცალკე განვიხილავთ.

ახლა განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც მინარეველი ატომები არაჩა-
ნაცვლებითაა. ამ შემთხვევაში ადვილია კრიტერიუმის დადგენა, თუ რო-
დის მიიღება დონორი ან აქცეპტორი. მართლაც, დონორი მიიღება იმ
შემთხვევაში, როდესაც მინარევი ატომი ელექტროდადებითაა, ე. ი. სა-
ვალენტო ელექტრონის იონიზაციის ენერგია ნიცირეა. ასეთია მეტალების
შემთხვევა. პირიქით, თუ მინარევი ატომები ელექტროუარყოფითია, ისინი
იერთებენ ელექტრონს, ე. ი. აქცეპტორები ხდებიან.

ჩვენ აქამდე ვიხილავდით მარტივ ნივთიერებებს, როგორიცაა Ge და
Si. ანალოგიურად შეიძლება დავადგინოთ დონორული და აქცეპტორული
ღონეები ნაერთის შემთხვევაში. ვთქვათ, მოცემულია ნაერთი, მაგალითად
 Cu_2O . სტექქომეტრული თანაფარდობაა $Cu : O = 2 : 1$. სინამდვილეში
ყოველთვის ადგილი აქვს სტექქომეტრული თანაფარდობის დარღვევას.
თუ მეტალები ჭარბობს, მაშინ გვექნება ან კვანძთა შორის მეტალის
ატომები, ანდა მეტალოიდის ვაკანსიები. ორივე შემთხვევა გვაძლევს დო-
ნორულ ღონეებს. მართლაც, კვანძთა შორის მეტალის ატომები რომ დო-
ნორულ ღონეებს გვაძლევენ, ეს ადვილი გასაგებია ბათი მცირე იონიზა-
ციის ენერგიის გამო. მეტალოიდის ვაკანსიები კი იქცევა 'მებრუნე-
ბულად კვანძთა შორის მეტალოიდის ატომებისა. თუ ჭარბობს მეტა-
ლოიდის ატომები, მაშინ გვექნება ან კვანძთა შორის მეტალოიდის
ატომები, ან მეტალის ვაკანსიები. ორივე შემთხვევაში ვღებულობთ აქცე-
პტორულ ღონეებს. როდესაც სტექქომეტრული თანაფარდობა ზუსტად
დაცულია, ე. ი. $Cu : O = 2 : 1$. გვექნება მხოლოდ საკუთარი გამტარე-
ლობა, ისიც მალაღ ტემპერატურაზე. ცდის σ ანახმაღ, Cu_2O ყოველთვის
 p ტიპისაა, ე. ი. მასში სტექქომეტრული თანაფარდობა დარღვეულია.
ამასთან სიჭარბე გვაქვს ენგბადის ატომისა. ZnO ყოველთვის n ტიპის
ნახევარგამტარია, ამ შემთხვევაში მეტალის ატომები ჭარბობს.

როდესაც Ce ან Si-ში შეტანილია N_d დონორი და N_A აქცეპტორი,
მაშინ სურათი შედარებით უფრო რთულია. ელექტრონები დონორული
ღონეებიდან გადადიან აქცეპტორულ ღონეებზე და გვაძლევენ დონორების
ნაწილობრივ კომპენსაციას. თუ $N_d > N_A$, მაშინ გვექნება n ტიპის ნახევარ-
გამტარი, თუ $N_d < N_A$, მაშინ p ტიპის ნახევარგამტარი. თუ მინარევი
ატომების კონცენტრაცია საკმარისად დიდია ($\sim 10^{18}/\text{სმ}^3$), მაშინ აკრძალულ
ზონაში დისკრეტული ღონეების ნაცვლად გვექნება ვიწრო დასაშვები
ზონა. ამ შემთხვევაში ჩვენ საქმე გვაქვს ეგრეთ წოდებულ ნახევარმე-
ტალთან.

დასასრულს მოკლედ განვიხილოთ, თუ როგორ იცვლება ზონაში კვან-

ტურ მდგომარეობათა რიცხვი მინარეების შეტანის დროს. თუ N არის Ge ან Si-ს ატომების რიცხვი, მაშინ ზონაში გვექნება $2(2l+1)N$ კვანტური მდგომარეობა. როდესაც Ge ან Si-ში შეგვაქვს N_d დონორი, ისინი იკავებენ Ge ან Si ატომების ვაკანტურ ადგილებს, ამიტომ ზონაში N_d კვანტური მდგომარეობანი გაქრება, სამაგიეროდ ამდენივე კვანტური მდგომარეობა გაჩნდება აკრძალულ ზონაში. ყველა ამ მდგომარეობას დონორებისა ეთანადება ერთი და იგივე E_d ენერგია, ამიტომ აკრძალულ ზონაში გვექნება N_d ჯერადად გადაგვარებული დისკრეტული დონე.

სრულიად ანალოგიურ მდგომარეობას აქვს ადგილი, როდესაც Ge ან Si-ში შეტანილია N_A აქცეპტორები, ზონას მოსცილდება N_A დონე, სამაგიეროდ აკრძალულ ზონაში მივიღებთ N_A ჯერადად გადაგვარებულ დისკრეტულ დონეს.

§ 3. იზომენარეობიანი ზედაპირები და ზონური სურათი Ge და Si-თვის

როგორც ვიცით, ზონის შიგნით ელექტრონის ენერგია ტალღური ვექტორის ფუნქციაა $E = E(k)$. ამ ფუნქციის სახე ცნობილი არ არის. მეტალთა შემთხვევაში ჩვენ გვინტერესებს $E(k)$ ფუნქციის სახე ფერმის საზღვრის მახლობლად, რადგანაც თითქმის ყველა მოვლენაში არსებით როლს ასრულებენ მხოლოდ ფერმის საზღვრის მახლობლად მდებარე ელექტრონები. ნახევარგამტარების შემთხვევაში ჩვენ გვინტერესებს $E(k)$ ფუნქციის სახე გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირის და ვალენტური ზონის ზედა ნაპირის მახლობლობაში. რადგანაც უმეტეს შემთხვევაში დონორებისა და აქცეპტორების კონცენტრაცია დიდი არ არის (სანამ ნახევარგამტარი გადაგვარებული არ არის), ამიტომ გამტარებლობის ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაცია ისეთია, რომ ისინი იკავებენ მხოლოდ ზონის ნაპირთან ახლომდებარე დონეებს.

უპირველეს ყოვლისა, განვიხილოთ $E(k)$ ფუნქციის სახე გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირის მახლობლობაში. თუ დავუშვებთ, რომ გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირს ეთანადება $k=0$, მაშინ $E(k)$ შეგვიძლია დავშალოთ k -ს ხარისხებად. ამრიგად, ფუნქტორი მასის მიახლოებაში გვექნება:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right), \quad (6.6)$$

სადაც m_x^* , m_y^* და m_z^* ფუნქტორი მასის ტენზორის მთავარი მნიშვნელობებია. იზოტროპული მასის შემთხვევაში ($m_x^* = m_y^* = m_z^* = m^*$)

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot k^2.$$

$E(k) = \text{const}$ წარმოადგენს იზოენერგეტიკულ ზედაპირებს. ამრიგად, მცირე k -ს შემთხვევაში იზოენერგეტიკულ ზედაპირებს წარმოადგენენ სფეროები

$$k = \text{const} \quad (6.7)$$

იზოტროპული მასის შემთხვევაში და ელიფსოიდებს

$$\frac{k_x^2}{m_x^2} + \frac{k_y^2}{m_y^2} + \frac{k_z^2}{m_z^2} = \text{const} \quad (6.8)$$

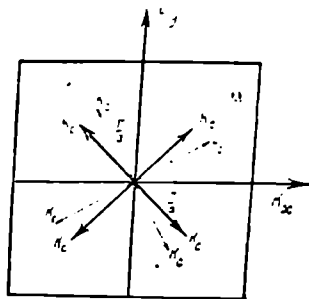
ანიზოტროპული ეფექტური მასის შემთხვევაში, რომელთა ცენტრია $k=0$ წერტილი. ცდებით გამოიკვია, რომ Ge და Si-ს შემთხვევაში იზოენერგეტიკული ზედაპირების სურათი უფრო რთულია, ვიდრე ამას მანამდე ფიქრობდნენ. აღმოჩნდა, რომ გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირს $k=0$ არ ეთანადება, არამედ ეთანადება რაღაც k_c მნიშვნელობა. ამის გამო, როგორც ამას ქვემოთ დაეინახავთ, გამტარებლობის ზედა ნაპირს ეთანადებიან არა ერთი, არამედ რამდენიმე იზოენერგეტიკული ზედაპირები—ელიფსოიდები. ეს გარემოება აიხსნება შემდეგი მიზეზებით: აღნიშნული კრისტალები კუბური სიმეტრიისაა, ამიტომ, თუ შესაძლებელია ნულისაგან განსხვავებული k_c -ს რაიმე მნიშვნელობა, მაშინ შესაძლებელია აგრეთვე k_c -ს ყველა ის მნიშვნელობები, რომლებიც მიიღებიან კუბური სიმეტრიის ყველა გარდაქმნის შედეგად. მაშასადამე, მოცემულ k_c -ს კუბური სიმეტრიის კრისტალში ეთანადება რამდენიმე ეკვივალენტური მიმართულება, რომელთა ბოლო წერტილები წარმოადგენენ იზოენერგეტიკული ზედაპირების ცენტრებს. გავარჩიოთ ეს საკითხი უფრო დეტალურად ბრტყელი მესერის შემთხვევაში. ორთოგონალური მესერის შემთხვევაში ($a_1 = a_2 = a$) დაყვანილი ტალღური ვექტორის ყველა მნიშვნელობა მოცემულია ბრილუენის ცენტრალური ზონის შიგნით

$$-\pi/a < k_x \leq \pi/a,$$

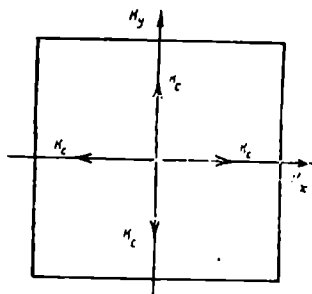
$$-\pi/a < k_y < \pi/a.$$

დაეუშვათ, რომ გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირს ეთანადება ნულისაგან განსხვავებული დაყვანილი ტალღური ვექტორი k_c . აქ საჭიროა ორი შემთხვევის გარჩევა. 1) როდესაც k_c ვექტორის ბოლო წერტილი მდებარეობს ბრილუენის ზონის შიგნით და 2) როდესაც k_c ვექტორის ბოლო წერტილი მდებარეობს ბრილუენის ზონის საზღვარზე. ჯერ გავარჩიოთ პირველი შემთხვევა: ვთქვათ, k_c აქვს რაიმე მიმართულება, მაშინ გვექნება რამდენიმე ეკვივალენტური მიმართულება, რომლებიც მიიღებიან კუბური სიმეტრიის გარდაქმნებით. როგორც ვიცით, კუბური სიმეტრიის კრისტალს აქვს მეოთხე რიგის სამი სიმეტრიის ღერძი და სამი სიმეტრიის სიბრტყე, შესაბამისი გარდაქმნებისა: მობრუნება 90° -ზე და სარკული არეკვლები აღნიშნულ სიბრტყეებზე. ადვილი წარმოსადგენია, რომ კვად-

რატული მესერის შემთხვევაში გვექნება 8 ეკვივალენტური მიმართულება, მათ შორის ოთხი ეთანადება 90° -ზე მობრუნებას (ნახ. 62-ზე ნაჩვენებია უწყვეტი ხაზებით) და ოთხ სარკულ არეკვლას (ნახ. 62-ზე ნაჩვენებია წყვეტილი ხაზებით), ადვილი წარმოსადგენია, რომ სივრცითი კუბური მესერის შემთხვევაში (როდესაც k_c -ს მიმართულება არ ემთხვევა არც ერთ კრისტალოგრაფიულ მიმართულებას) მიიღებინ 48 ეკვივალენტური მიმართულებანი k_c -თვის. ყველა ამ k_c ვექტორის ბოლო წერტილები იქნებიან იზოენერგეტიკულ ზედაპირთა ცენტრები. მაგრამ, თუ k_c -ს მიმართულება ემთხვევა ერთ-ერთ კრისტალოგრაფიულ მიმართულებას, მაშინ ეკვივალენტურ მიმართულებათა რიცხვი ჩვენება შემთხვევა, როდესაც k_c -ს



ნახ. 62.

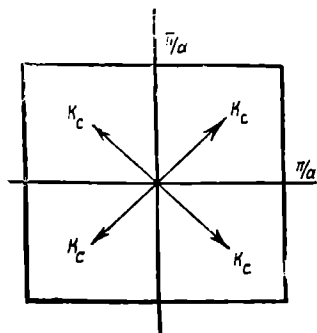


ნახ. 63.

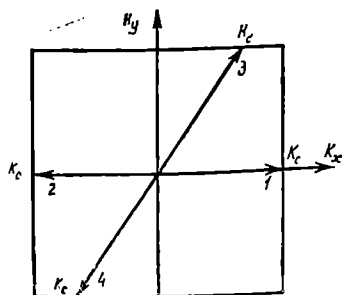
ბევრად შემცირდება. ნახ. 63-ზე ნა- მიმართულება ემთხვევა (100) მიმარ- თულებას. ამ შემთხვევაში ღერძის გარშემო მობრუნება და სიბრტყეზე არეკვლა ერთი და იგივე შედეგებს იძლევიან, ამიტომ k_c -ს ექნება სიბრ- ტყითი მესერის შემთხვევაში 4, ხოლო სივრცითი მესერის შემთხვევაში 6 ეკვივალენტური მიმართულებანი, ესენია: $[100]$, $[010]$, $[0,01]$, $[\bar{1}00]$, $[0\bar{1}0]$ და $[00\bar{1}]$. როდესაც k_c -ს მიმართულება ემთხვევა (111) მი- მართულებას, კუბური სიმეტრიის გარდაქმნები იძლევიან სიბრტყითი მესერის შემთხვევაში 4, ხოლო სი-

ვრცითი მესერის შემთხვევაში 8 ეკვივალენტურ მიმართულებებს, ესენია $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}1\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$ და $[\bar{1}\bar{1}1]$. განვიხილოთ ახლა შემთხვევა, როდესაც k_c ვექტორის ბოლო წერტილი ემთხვევა ბრილუ- ენის ბონის ნაპირს. ამ შემთხვევაში k_c -ს შესაძლო მნიშვნელობები ორჯერ შემცირდება. მართლაც, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 65-ზე, k_c -ს ერთი და იგივე მნიშვნელობები ეთანადებიან 1 და 2, ასევე 3 და 4 წერ- ტილებს, რადგანაც 1 და 2 წერტილების შესაბამისი k_c ერთმანეთისაგან განსხვავდებიან $2\pi g = \frac{2\pi}{a}$ სიდიდით, მეორე მხრივ, დაყვანილი ვექტორი

ამ შესაყრებამდე სიზუსტით არის განსაზღვრული. იგივე ითქმის 3 და 4 წერტილების შესაბამისი k_c -თვის.

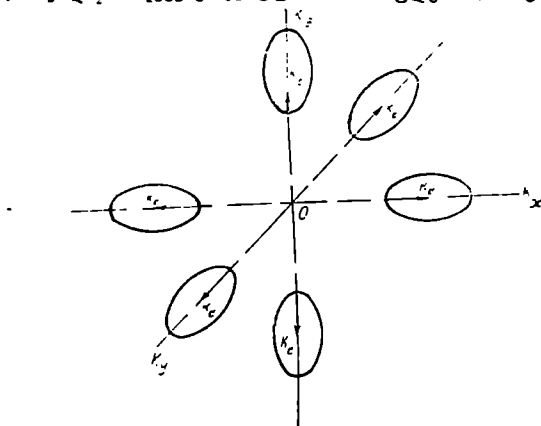


ნახ. 64.



ნახ. 65.

ცდები გვაძლევენ Si-ის შემთხვევაში 6 იზოენერგეტიკულ ზედაპირს, რომლებიც ბრუნვის ელიფსოიდებს წარმოადგენენ. მათი დიდი ღერძები მიმართულია (100) და მისი ეკვივალენტური მიმართულებით, როგორც ეს ნაჩვენებია



ნახ. 66.

ნებია ნახ. 66-ზე. რადგანაც იზოენერგეტიკულ ზედაპირებს წარმოადგენენ ბრუნვის ელიფსოიდები, ამიტომ მათ ეთანადებათ ორი ეფექტური მასა. სიგრძივი (m_c^*) და განივი (m_t^*) ორგვარი ეფექტური მასის არსებობა გამომდინარეობს თვით ეფექტური მასის განსაზღვრებიდან

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} \quad (2)$$

მეორე მხრივ, სიდიდე $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ წარმოადგენს ზედაპირის სიმრუდის ზო-

მას. ბრუნვის ელიფსოიდის შემთხვევაში დიდი და პატარა ღერძების გასწვრივ გვაქვს სხვადასხვა სიმრუდის ენერგეტიკული ზედაპირები, რომლებსაც ეთანადებთან სიგარძივი და განივი მასები. ცდების თანახმად, As_2S_3 -ს შემთხვევაში გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირისათვის გვაქვს

$$m_e^* = 0,98 m,$$

$$m_i^* = 0,19 m.$$

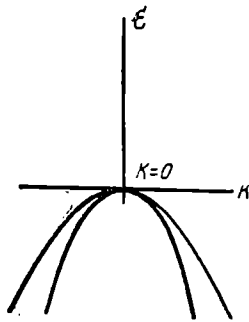
Ge-ს შემთხვევაში მიიღება 8 ან 4 იზოენერგეტიკული ზედაპირები, იმისდა მიხედვით k_z ვექტორის ბოლო წერტილი მდებარეობს ბრილუენის ზონის შიგნით თუ ნაპირზე. აქაც მიიღებთან ბრუნვის ელიფსოიდები, რომელთა დიდი ღერძები მიმართულია (111) და მისი ეკვივალენტური მიმართულებით. Ge-ს შემთხვევაში ზუსტად არ არის დადგენილი 8 ენერგეტიკული ზედაპირი მიიღება თუ 4.

ცდების თანახმად, Ge-ს გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირისათვის სიგარძივი და განივი ეფექტური მასებისათვის მიიღება შემდეგი მნიშვნელობები:

$$m_e^* = 1,58 m,$$

$$m_i^* = 0,08 m.$$

გავარჩიოთ ახლა იზოენერგეტიკული ზედაპირების სურათი სავალენტო ზონის ზედა ნაპირის მახლობლად. ზონის კიდეზე $k_z = 0$, მაგრამ სამაგიეროდ გართულება გამოწვეულია იმით, რომ $k_z = 0$ წერტილზე ადგილი აქვს ორი ზონის შეხებას, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 67-ზე. ამ ზედაპირებს ეთანადება განსხვავებულ ეფექტური მასები. თანახმად (ა) დამოკიდებულებისა, მეტად გამრუდებულ ზედაპირს ეთანადება ნაკლები სიდიდის ეფექტური მასა და პირიქით: ნაკლებად გამრუდებულ ზედაპირს—მეტი სიდიდის ეფექტური მასა. შესაბამისად, ამისა, შემოყავთ ორგვარი ზერელი: მძიმე და მსუბუქი. ცდების თანახმად, გვაქვს:



ნახ. 67.

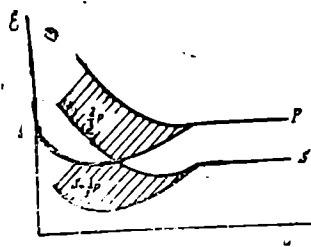
Ge-თვის $m_p^* = 0,04 m$ და $0,4 m$,

Si-თვის $m_p^* = 0,16 m$ და $0,46 m$.

დასასრულს განვიხილოთ ზონური სურათი Ge და Si-თვის, ეს ატომები ოთხვალენტურია. ორი სავალენტო ელექტრონი იმყოფება s მდგომარეობაში.

მარეობაში და 2 ელექტრონი p მდგომარეობაში. როდესაც ეს ატომები ადგენენ მყარ მდგომარეობას, მყარ სხეულში იზოლირებული ატომის ყოველ დისკრეტულ ენერგეტიკულ დონეს ეთანადება ზონა, სადაც კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი უდრის $2(2l+1)N$.

s მდგომარეობაში ($l=0$) გვაქვს $2N$ კვანტური მდგომარეობა, რომელთა შესავსებად გვაქვს $2N$ ელექტრონი (ორი s ელექტრონი თითო ატომიდან), p მდგომარეობის შესავსების ზონაში გვაქვს $6N$ კვანტური მდგომარეობა, მათი შესავსებად კი გვაქვს მხოლოდ $2N$ ელექტრონი (2 p ელექტრონი თითო ატომიდან), ამიტომ ეს კრისტალები უნდა წარმოადგენდეს ტიპურ მეტალებს. სინამდვილეში კი, ისინი არამეტალებია. ეს გარკვევა აიხსნება შემდეგნაირად: როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, Ge და Si კრისტალებიდან ალმასის ტიპის მესერაში, რომელიც შედგება ორი წახნაგეზობრივებული კუბური მესერის ერთობლიობი-საგან. ისინი ერთიმეორის მიმართ გადაწყველილი სივრცითი დიაგონა-



ნახ. 68. ატომებს შორის მანძილი.

ლის $1/4$ -ზე. ელემენტარულ უჯრედს შეადგენს რომბოედრი. მასზე მოდის ორი ერთნაირი ატომი (ერთი—რომბოედრის წვეროებზე, მეორე—რომბოედრის შიგნით), მაგრამ, ეს ატომები ტრანსლაციურად ეკვივალენტური არ არიან. ამ შემთხვევაში ზემოთ მოცემული (თავი IV, § 8) მეტალებისა და არამეტალების განსაზღვრის წესი შეიძლება დაირღვეს. ზონური სურათის გასარკვევად ჩა-

ტარებულ იქნა გამოთვლები, თუ როგორ იცვლება კრისტალის ენერგია ატომთა შორის მანძილის თანდათანობითი ცვლილების დროს. ეს დამოკიდებულება მოცემულია ნახ. 68-ზე. როდესაც ატომებს შორის მანძილი დიდია, ე. ი. ატომებს შორის ურთიერთქმედება მცირეა, გვაქვს დისკრეტული s და p დონეები, ისე როგორც იზოლირებულ ატომებში. ატომებს შორის მანძილის შემცირებით ურთიერთქმედება თანდათანობით იზრდება. შედეგად ამისა, თითოეული დისკრეტული დონე (s და p) განიერდება და გადადის ზონაში. როდესაც ატომებს შორის მანძილი გახდება მყარ სხეულში ატომებს შორის წონასწორული მანძილის ტოლი, p ზონა იხლიჩება ორ ზონად: ზონის $1/3$ ნაწილი უერთდება s ზონას

და გვაძლევს ჰიბრიდულ ზონას $s + \frac{1}{3} p$. ზონის $2/3$ ნაწილი გამოეყოფა ჰიბრიდულ ზონას გარკვეული სიდიდის აკრძალული ზონით. ჰიბრიდულ ზონაში გვაქვს $4N$ კვანტური მდგომარეობა ($2N$ მდგომარეობას იძლევა p ზონა, ასევე $2N$ მდგომარეობას იძლევა s ზონა), რომელიც მთლიანად

შეესებულია $4N$ ვალენტური ელექტრონებით, შემდეგი $\frac{2}{3} p$ ზონა სრულიად თავისუფალია ელექტრონებით, ამგვარად, მივიღეთ არამეტალეზის სურათი.

§ 4. გამტარუნარიანობის ელემენტარებისა და სავალენტო ხვრელების კონცენტრაცია მონიტორინგის კონცენტრაციის განსაზღვრა

გამტარუნარიანობის ელემენტარებისა და სავალენტო ხვრელების კონცენტრაცია მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f_e(E) G_e(E) dE \quad (6.7)$$

და

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} f_p(E) G_p(E) dE, \quad (6.8)$$

სადაც $f_e(E)$ და $f_p(E)$ არის განაწილების ფუნქცია ელექტრონებისა და ხვრელებისა სათანადოდ, ხოლო $G_e(E)$ და $G_p(E)$ კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივეები გამტარუნარიანობისა და სავალენტო ზონაში. ამ ფუნქციების ანალიზური სახე მოცემულია მხოლოდ ზონის ნაპირების მახლობლობაში (4.83 და 4.88), ეს სახეებით საკმარისია, რადგანაც ნახევარგამტარების შემთხვევაში ელექტრონები იკავებენ ზონის ნაპირის მახლობელ დონეებს. მეორე მხრივ, (6.7) და (6.8) ფორმულებში ინტეგრირება ხდება მთელ ზონაში, სადაც ($G_e(E)$ და $G_p(E)$) ფუნქციების სახე უცნობია, მაგრამ ამ გარემოებას არსებითი მნიშვნელობა არა აქვს შემდეგი მიზეზების გამო: განაწილების ფუნქციები $f_e(E)$ და $f_p(E)$ გვაძლევს ალბათობას იმისა, რომ კვანტური მდგომარეობა, რომელსაც ეთანადება ენერგია E , დაკავებულია ($f_e(E)$) ან არაა დაკავებული ($f_p(E)$) ელექტრონით. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ნახევარგამტარების შემთხვევაში, მხოლოდ ზონის ნაპირებთან მდებარე კვანტური მდგომარეობები დაკავებულია ელექტრონით ან ხვრელით. დიდი ენერგიების შემთხვევაში სათანადო დონეების დაკავების ალბათობა ნულის ტოლია, ამიტომ G_e და G_p ფუნქციების ზუსტი მნიშვნელობების ცოდნა საჭირო არ არის. თუ (6.7 და 6.8) ფორმულებში ჩავსვათ $f(E)$ და $G(E)$ მნიშვნელობებს, მივიღებთ

$$n = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \int_{E_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - E_c} dE}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1} \quad (6.9)$$

და

$$p = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{E_v} \frac{\sqrt{E_v - E}}{e^{\frac{\mu - E}{kT}} + 1} dE \quad (6.10)$$

ა) არაგადაგვარებული გაზის (ელექტრონული ან ხერელური) შემთხვევა.

ეთქვით,

$$E_c - \mu \gg kT \quad (6.11)$$

ან

$$\mu - E_v \gg kT,$$

თუ ეს პირობები დაცულია, მაშინ

$$E - \mu \gg kT \quad \text{რადგანაც } E > E_c$$

და

$$\mu - E \gg kT \quad \text{„} \quad E < E_c$$

ამ შემთხვევაში განაწილების ფუნქციებში მნიშვნელში ერთიანი შეიძლება უგულებელვყოთ, ე. ი.

$$f_e(E) \simeq e^{-\frac{E - \mu}{kT}}$$

და

$$f_p(E) \simeq e^{-\frac{\mu - E}{kT}}.$$

ეს უკანასკნელი კი წარმოადგენს კლასიკურ განაწილების ფუნქციას, ბოლცმანის განაწილების ფუნქციას. მაშასადამე (6.11) პირობები წარმოადგენენ გაზის არაგადაგვარების პირობებს. ამრიგად

$$n = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot e^{\frac{\mu}{kT}} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c} e^{-\frac{E}{kT}} dE \quad (6.9a)$$

$$p = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{\mu}{kT}} \int_{-\infty}^{E_v} \sqrt{E_v - E} e^{\frac{E}{kT}} dE, \quad (6.10a)$$

შემოვიტანოთ აღნიშვნა

$$\frac{E - E_c}{kT} = x,$$

მაშინ

$$\begin{aligned} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c} e^{-\frac{E}{kT}} dE &= e^{-\frac{E_c}{kT}} \cdot (kT)^{3/2} \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \\ &= e^{-\frac{E_c}{kT}} \cdot (kT)^{3/2} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \end{aligned}$$

ანალოგიურად

$$\int_{-\infty}^{E_v} \sqrt{E_v - E} e^{\frac{F}{kT}} dE = e^{\frac{E_v}{kT}} (kT)^{3/2} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

საბოლოოდ, არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში, გამტარებლობის ელექტრონებისა და სავალენტო ხვრელების კონცენტრაციისათვის ვღებულობთ შემდეგ ფორმულებს:

$$n = N_c e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} \quad (6.12)$$

და

$$p = N_v e^{\frac{E_v - \mu}{kT}}.$$

სადაც

$$N_c = 2 \left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2},$$

$$N_v = 2 \left(\frac{m_p^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (6.13)$$

გავარჩიოთ N_c და N_v სიდიდეების ფიზიკური შინაარსი, განაწილების ფუნქცია

$$f_e(E) \simeq e^{\frac{\mu - E}{kT}}$$

გვაძლევს ალბათობას იმისა, რომ კვანტური მდგომარეობა ენერგიით E

დაკავებულია ელექტრონით. თუ $E = E_c$, მაშინ $f_e(E_c) \simeq e^{\frac{\mu - E_c}{kT}}$ იქნება ალბათობა იმისა, რომ კვანტური მდგომარეობა, რომელსაც ეთანადება ენერგია E_c (გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირი) დაკავებულია, ამიტომ ფორმულა

$$n = N_c e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = N_c f_e(E_c)$$

მიგვითითებს იმაზე, რომ ზონაში გამტარებლობის ელექტრონების განსაზღვრის დროს შეიძლება ზონას ყურადღება არ მივაქციოთ, ნაცვლად ამისა, ავიღოთ ერთი დონე $E = E_c$ და ვიგულისხმოთ, რომ ეს დონე N_c ჯერადად არის გადაგვარებული. N_c -ს ეწოდება გამტარებლობის ზონის ეფექტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე. ანალოგიურად განისაზღვრება N_v . მას ეწოდება ვალენტური ზონის ეფექტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე. გადაგვარებული გაზის შემთხვევაში ძალაში რჩება იგივე განმარტებები N_c და N_v -თვის, მხოლოდ ისინი უფრო რთული სახით არიან დაკავშირებული m_e^* , m_p^* და kT სიდიდეებთან, ვიდრე ეს მოცემულია (6.13) ფორმულებით.

(6.13) ფორმულებში შევიტანოთ უნივერსალური მუდმივების რიცხვითი მნიშვნელობები, მივიღებთ:

$$N_c \simeq 2,5 \cdot 10^{13} \left(\frac{m_e^*}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \quad (6.13a)$$

$$N_v \simeq 2,5 \cdot 10^{18} \cdot \left(\frac{m_p^*}{m} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}.$$

ოთახის ტემპერატურაზე ($T = 300^\circ K$)

$$N_c \simeq 2,5 \cdot 10^{10} \left(\frac{m_e^*}{m} \right)^{3/2} \sim 10^{18} / \text{სმ}^3$$

და

$$N_v \simeq 2,5 \cdot 10^{10} \left(\frac{m_p^*}{m} \right)^{3/2} \sim 10^{19} / \text{სმ}^3.$$

როგორც ქვემოთ დავინახავთ, ჰიმიური პოტენციალის მნიშვნელობა დამოკიდებულია მინარევების კონცენტრაციაზე, ამიტომ, თანახმად (6.12) ფორმულებისა, ცალ-ცალკე n და p დამოკიდებული იქნებიან მინარევთა კონცენტრაციაზე, მაგრამ ნამრავლი

$$np = N_c N_v e^{-\frac{E_c - E_v}{kT}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

მინარევთა კონცენტრაციაზე დამოკიდებული არ არის.

შემოვიტანოთ ინვერსიული სიმკვრივე n_i შემდეგნაირად

$$n_i = \sqrt{np} = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}, \quad (6.14)$$

ანდა

$$np = n_i^2.$$

ინვერსიული სიმკვრივის ფიზიკური შინაარსის გასაგებად დავუშვათ, რომ ნახევარგამტარი არ შეიცავს მინარევებს, მაშინ გვექნება მხოლოდ საკუთარი გამტარებლობა $n = p$, ე. ი.,

$$n = p = n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$

მაშასადამე, ინვერსიული კონცენტრაცია n_i არის ელექტრონების ის კონცენტრაცია, რომელიც შეესაბამება საკუთარ გამტარებლობას მოცემულ ტემპერატურაზე. თანახმად (6.14) დამოკიდებულებისა, დონორების შეტანით გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვი გაიზრდება, სამაგიეროდ, ამდენჯერვე შემცირდება სავალენტო ხვრელების რიცხვი. ასევე აქცეპტორების შეტანით სავალენტო ხვრელების რიცხვი გაიზრდება, სამაგიეროდ

ამდენჯერვე შემცირდება გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვი. ვინაიდან n ტიპის ნახევარგამტარებში გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვი არ შეიძლება უსასრულოდ დიდი იყოს, ამიტომ მოცემულ ნახევარგამტარებში ყოველთვის გვექნება ხვრელების გარკვეული რიცხვი. ამ შემთხვევაში ელექტრონები n ტიპის ნახევარგამტარებში იქნებიან ძირითადი მატარებლები, ხოლო ხვრელები—არაძირითადი მატარებლები. სრულიად ასევე, p ტიპის ნახევარგამტარში ხვრელები იქნებიან ძირითადი მატარებლები, ხოლო ელექტრონები—არაძირითადი.

ბ) გადაგვარებული გაზის (ელექტრონული ან ხვრელური) შემთხვევა

გადაგვარებული გაზის შემთხვევაში ფერმი-დირაკის განაწილები ფუნქციაში მნიშვნელში ერთის გადადება არ შეიძლება. ამ შემთხვევაში (6.9) და (6.10) ინტეგრალების აღება ძალიან რთულდება. აღნიშნული ფორმულები შეიძლება ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \int_{E_c}^{\infty} \frac{\left(\frac{E - E_c}{kT} \right)^{1/2} d \frac{E}{kT}}{e^{\frac{E - \mu}{kT}} + 1}.$$

და

$$p = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_v \int_{-\infty}^{E_v} \frac{\left(\frac{E_v - E}{kT} \right)^{1/2} d \frac{E}{kT}}{e^{\frac{\mu - E}{kT}} + 1}.$$

შევცვალოთ პირველ ინტეგრალში $E - E_c = kT \cdot \eta$, ხოლო მეორე ინტეგრალში $E_v - E = kT \cdot \eta$, ეს გვაძლევს

$$\frac{n}{N_c} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\eta} d\eta}{e^{\eta + \frac{E_c - \mu}{kT}} + 1}$$

და

$$\frac{p}{N_v} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\eta} d\eta}{e^{\eta + \frac{\mu - E_v}{kT}} + 1},$$

(6.15).

შემოვიტანოთ $\xi(x)$ ფუნქცია შემდეგი სახით:

$$x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\eta} d\eta}{e^{\eta - \xi} + 1}. \quad (6.16)$$

გავარჩიოთ ორი კიდური შემთხვევა:

1) $\xi \ll -1$, $x \ll 1$ ე. ი. $e^{\eta-\xi} \gg 1$. ამ შემთხვევაში მნიშვნელში ერთის გადაგდება შეიძლება, ეს გვაძლევს:

$$x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{\xi} \int_0^{\infty} \sqrt{\eta} e^{-\eta} d\eta = e^{\xi}.$$

აქედან

$$\xi(x) = \ln x \quad (6.17)$$

2) $\xi \gg 1$, $x \gg 1$ მაშინ

$$\frac{1}{e^{\eta-\xi} + 1} \sim \begin{cases} 1 & \text{როცა } \eta < \xi \\ 0 & \text{,, } \eta > \xi \end{cases}$$

ამიტომ

$$x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\eta} d\eta}{e^{\eta-\xi} + 1} \simeq \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\xi} \sqrt{\eta} d\eta = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \xi^{3/2},$$

აქედან

$$\xi = \left(\frac{9\pi}{16} \right)^{1/3} x^{2/3}. \quad (6.18)$$

თანახმად აღნიშვნისა

$$x = \frac{n}{N_c} \quad \text{ან} \quad x = \frac{p}{N_v}$$

$$\frac{\mu - E_c}{kT} = \xi \left(\frac{n}{N_c} \right) \quad \text{ან} \quad \frac{E_v - \mu}{kT} = \xi \left(\frac{p}{N_v} \right).$$

აქედან

$$E_c = \mu - kT \xi \left(\frac{n}{N_c} \right) \quad \text{და} \quad E_v = \mu + kT \xi \left(\frac{p}{N_v} \right). \quad (6.19)$$

არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში; თანახმად (6.17) ფორმულისა, გვაქვს:

$$E_c = \mu - kT \ln \frac{n}{N_c}$$

და

$$E_v = \mu + kT \ln \frac{p}{N_v}. \quad (6.20)$$

(6.15) ფორმულები უფრო ზოგადია, რომლებიც ორ ზემოთ განხილულ კერძო შემთხვევაში იძლევიან

1) როცა $x \ll 1$ ანდა $n \ll N_c$

„ „ „ $p \ll N_v$

$$E_c = \mu - kT \ln x = \mu - kT \ln \frac{n}{N_c},$$

$$E_v = \mu + kT \ln x = \mu + kT \ln \frac{p}{N_v},$$

2) როცა $x \gg 1$ ანდა $n \gg N_c$,

" " " $p \gg N_v$,

მაშინ

$$E_c = \mu - \left(\frac{9\pi}{16}\right)^{1/3} kT \left(\frac{n}{N_c}\right)^{2/3}, \quad (6.21)$$

$$E_v = \mu + \left(\frac{9\pi}{16}\right)^{1/3} \cdot kT \cdot \left(\frac{p}{N_v}\right)^{2/3}.$$

თანახმად (6.20) დამოკიდებულებისა, $E_c < \mu$ და $E_v > \mu$. ე. ი. არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში ქიმიური პოტენციალი მოთავსებულია აკრძალულ ზონაში. თანახმად (6.21) დამოკიდებულებისა, $E_c < \mu$ და $E_v > \mu$, ე. ი. გადაგვარებული გაზის შემთხვევაში ქიმიური პოტენციალი მოთავსებულია გამტარებლობის ან ვალენტურ ზონაში.

თანახმად (5.19) ფორმულებისა

$$E_c - E_v = -kT \left(\xi \left(\frac{n}{N_c} \right) + \xi \left(\frac{p}{N_v} \right) \right) > 0, \quad (6.22)$$

ე. ი.

$$\xi \left(\frac{n}{N_c} \right) + \xi \left(\frac{p}{N_v} \right) < 0.$$

არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში

$$\xi(x) = \ln x.$$

ამიტომ

$$E_c - E_v = -kT \left(\ln \frac{n}{N_c} + \ln \frac{p}{N_v} \right) = -kT \ln \frac{np}{N_c N_v}.$$

აქედან ვღებულობთ ცნობილ დამოკიდებულებას

$$np = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}},$$

სადაც

$$E_g = E_c - E_v.$$

§ 5. ელემენტარული და სპეციალური განაწილება
დონორებისა და აქცეპტორების

ფერმი-დირაკის განაწილების კანონი სამართლიანია გამტარებლობის ელექტრონებისა და სავალენტო ხერგებისათვის. დონორებსა და აქცეპტორებზე ელექტრონებისა და ხერგების განაწილების კანონი ცოტათი განსხვავდება ფერმი-დირაკის განაწილების კანონისაგან. ამის საილუსტრაციოდ სიმარტივისათვის განვიხილოთ ერთვალენტიანი დონორის შემთხვევა. დონორების რიცხვი აღვნიშნოთ N_d -თი. ყოველი ნეიტრალური დონორი შეიძლება დაიშალოს დადებით იონად და ელექტრონად

$$D^* \rightleftharpoons D^+ + e$$

წარმოვიდგინოთ, რომ ყველა დონორი იონიზირებულია და შემდეგ გარკვეული ალბათობით იონიზირებული ელექტრონები იკავებენ დონორის დონეებს მოცემულ ტემპერატურაზე. აღვნიშნოთ იონიზირებულ დონორთა რიცხვი N_d^+ და N_d^- -ით—ნეიტრალური, ე. ი.

$$N_d = N_d^+ + N_d^- \quad (6.23)$$

მოვინახოთ კომპლექციათა რიცხვი ანდა სტატისტიკური წონა ისეთი განაწილებისა, როდესაც N_d^+ დონორებზე მოთავსებულია ელექტრონები, ხოლო N_d^- დონორებზე ელექტრონები არა გვაქვს. ამასთან, გათვალისწინებული იქნეს პაულის აკრძალვისა და ელექტრონების განურჩევლობის პრინციპები, რომლებიც საფუძვლად უდევს ფერმი-დირაკის სტატისტიკას. საძიებელი სტატისტიკური წონა

$$P = \frac{N_d!}{N_d^+! (N_d - N_d^+)!} \quad (6.24)$$

ამ განაწილების სათანადო ენტროპია

$$S = k \ln P \quad (6.25)$$

თუ მოვინახეთ ენტროპიის მაქსიმუმს

$$\delta S(N_d^+) = 0, \quad (6.26)$$

შემდეგ ორი დამატებითი პირობების გათვალისწინებით

$$N_d^+ + n = N = \text{const},$$

$$\sum n_i E_i + E_d \cdot N_d^+ = E = \text{const}. \quad (6.27)$$

მივიღებთ ჩვეულებრივ ფერმი-დირაკის განაწილების კანონს. იონიზირებულ დონორზე შეიძლება დაჯდეს ელექტრონი ზევით ან ქვევით მიმართული სპინით, ე. ი. იონიზირებულ დონორზე გვექნება ორი კვანტური მდგომარეობა. თუ ერთ-ერთ კვანტურ მდგომარეობაზე დაჯდა ელექტრონი ერთი გარკვეული მიმართულების სპინით, მაშინ აღებული დონორის მეორე

კვანტურ მდგომარეობაზე მეორე ელექტრონი ველარ დაჟდება, ვინაიდან პირობის თანახმად დონორი ერთვალენტია. სხვანაირად რომ ვთქვათ, რთდესაც დონორის ერთ კვანტურ მდგომარეობაში დაჟდება ელექტრონი, მეორე კვანტური მდგომარეობა გადადის გამტარებლობის ზონაში. როდესაც იონიზირებულ დონორზე დაჟდება ერთი ელექტრონი გარკვეული მიმართულების სპინით, დონორი გახდება ნეიტრალური. ნეიტრალურ დონორს სპინით $\uparrow$ ან $\downarrow$ მიმართულს ეთანადება ერთი და იგივე ენერგია, ამიტომ ერთვალენტია დონორის დონე ორჯერადად არის გადაგვარებული. თავისუფალი ელექტრონების შემთხვევაში ელექტრონები კოლექტივიზირებული არიან მთელ კრისტალში, ამიტომ ყოველი კვანტური მდგომარეობა გამოყენებულია სტატისტიკური წონის გამოთვლის დროს. დონორებთან ლოკალიზებული ელექტრონების შემთხვევაში, როდესაც ერთი კვანტური მდგომარეობა ატომში დაკავებული გახდება ერთი ელექტრონით, მეორე კვანტური მდგომარეობა ქრება ანდა გადადის გამტარებლობის ზონაში. ეს გარემოება უნდა იქნეს გათვალისწინებული სტატისტიკური წონის განსაზღვრის დროს. მართლაც, ყოველ ნეიტრალურ დონორზე გვაქვს ელექტრონის სპინის ორი შესაძლო მდგომარეობა, $2N_d^{\uparrow}$ ნეიტრალურ დონორებზე გვექნება სპინების $2N_d^{\uparrow}$ შესაძლო მდგომარეობები, ამიტომ სტატისტიკური წონისათვის

$$P = 2^{N_d^{\uparrow}} \cdot \frac{N_d!}{N_d^{\uparrow}! (N_d - N_d^{\uparrow})!} \quad (6.28)$$

ამის შემდეგ გამოთვლები მიმდინარეობს ჩვეულებრივი გზით. ვეძებთ ენტროპიის მაქსიმუმს (5.27) დამატებითი პირობების გათვალისწინებით. საბოლოოდ განაწილების ფუნქციისათვის მიიღება შემდეგი ფორმულა

$$\frac{N_d^{\uparrow}}{N_d} = f_e(E_d) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_d - \mu}{kT}}}, \quad (6.29)$$

სადაც E_d არის დონორის შესაბამისი ენერგიის დონე. ვინაიდან

$$N_d^{\uparrow} = N_d - N_d^{\downarrow},$$

ამიტომ

$$\frac{N_d^{\downarrow}}{N_d} = f_p(E_d) = 1 - \frac{N_d^{\uparrow}}{N_d} = \frac{1}{1 + 2 e^{\frac{\mu - E_d}{kF}}}. \quad (6.30)$$

(6.29) არის ელექტრონების, ხოლო (6.30) — ხვრელების განაწილების ფუნქცია დონორებზე. ისინი ფერმი-დირაკის განაწილების კანონისაგან განსხვავდებიან $\frac{1}{2}$ ან 2 მაშრავლით.

სრულიად ანალოგიურად მიიღება ელექტრონებისა და ხვრელების განაწილება აქცეპტორებზე. ვთქვათ, აქცეპტორის შეუძლია მიღება მხოლოდ ერთი ელექტრონისა. აქცეპტორების რიცხვი იყოს N_A , მაშინ

$$N_A = N_A^* + N_A^-, \quad (6.31)$$

სადაც N_A^- არის აქცეპტორების რიცხვი, რომელზედაც სხედან ელექტრონები (იონიზირებული აქცეპტორები),

N_A^* — აქცეპტორები, რომელზედაც ელექტრონები არ სხედან ე. ი. დაკავებულია ხვრელებით (ნეიტრალური აქცეპტორების რიცხვი).

მაშინ ანალოგიური გამოთვლები გვაძლევნ

$$\frac{N_A^*}{N_A} = f_p(E_a) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_a - \mu}{kT}}}, \quad (6.32)$$

$$\frac{N_A^-}{N_A} = f_e(E_a) = \frac{1}{1 + 2 e^{\frac{E_a - \mu}{kT}}}. \quad (6.33)$$

(6.32) არის ხვრელების, ხოლო (6.33) — ელექტრონების განაწილების კანონი აქცეპტორებზე.

განვიხილოთ ახლა ზოგადი შემთხვევა, როდესაც დონორის შეუძლია ერთზე მეტი ელექტრონის გაცემა გამტარებლობის ზონაში და აქცეპტორის — ერთზე მეტი ხვრელის გადაცემა ვალენტურ ზონაში. ამ შემთხვევაში პეკარმა მიიღო შემდეგი ფორმულები.

დონორებზე ელექტრონების განაწილებისათვის

$$f_e(E_d) = \frac{1}{1 + \delta e^{\frac{E_d - \mu}{kT}}}, \quad (6.34)$$

აქცეპტორზე ხვრელების განაწილებისათვის

$$f_p(E_a) = \frac{1}{1 + \delta \cdot e^{\frac{\mu - E_a}{kT}}}, \quad (6.35)$$

სადაც $\delta = \frac{f}{g}$.

დონორის შემთხვევაში: g არის ნეიტრალური დონორის და f — იონიზირებული დონორის გადაგვარების ხარისხი.

აქცეპტორის შემთხვევაში: g არის იონიზირებული აქცეპტორის და f — ნეიტრალური აქცეპტორის გადაგვარების ხარისხი.

ერთვალენტიანი დონორის შემთხვევაში (Ge ან Si-ში V ჯგუფის ელემენტების მინარევები)

დონორის გადაგვარების ხარისხი $g=2$,

იონიზირებული დონორის გადაგვარების ხარისხი $f=1$,

ამიტომ

$$\delta = 1/2.$$

Ge-ში ან Si-ში III ჯგუფის ელემენტების მინარევის შემთხვევაში: იონიზირებული აქცეპტორის გადაგვარების ხარისხი $g=2$, ნეიტრალური აქცეპტორისა $f=1$, ამიტომ

$$\delta = 1/2.$$

განვიხილოთ VI ჯგუფის ელემენტების მინარევები Ge და Si-ში. მაგალითად S—I-მინარევები. თითოეულ მათგანს გამტარებლობის ზონაში შეუძლია მოცემა ორი ელექტრონისა, ე. ი. გვექნება სამი შემთხვევა S^x , S^+ და S^{++} . თუ უგულებელვყოფთ S^{++} იონებს, გვექნება: ნეიტრალური S^x -თვის $g=1$ და S^+ -თვის $f=2$, ამიტომ $\delta=2$ და ა. შ.

§ 6. ძიშიური პოტენციალის დამოკიდებულება მინარევთა კონცენტრაციასა და ტემპერატურაზე

გამტარებლობის ელექტრონებისა და სავალენტო ხვრელების კონცენტრაცია დამოკიდებულია მინარევთა კონცენტრაციაზე. ეს უკანასკნელი კი (6.12) ფორმულაში შედის ქიმიური პოტენციალის საშუალებით. ამიტომ, უპირველეს ყოვლისა, საჭიროა განვსაზღვროთ ქიმიური პოტენციალის დამოკიდებულება მინარევთა კონცენტრაციაზე. ვინაიდან კრისტალის შიგნით ელექტრონებისა და ხვრელების ნებისმიერი განაწილება არ ცვლის კრისტალის ელექტრულ მუხტებს, ამიტომ ქიმიური პოტენციალის განსაზღვრისათვის გამოვიყენებთ კრისტალის ელექტრონეიტრალობის პირობას. განვიხილოთ რამდენიმე შემთხვევა.

1. საკუთარი გამტარებლობა. ელექტრონეიტრალობის პირობა გვაძლევს:

$$n = p.$$

თუ ჩავსვამთ n და p მნიშვნელობებს (6.12) ფორმულის მიხედვით, მივიღებთ:

$$N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}} = N_v e^{-\frac{\mu - E_v}{kT}},$$

ანდა

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = \sqrt{\frac{N_c}{N_v}} e^{\frac{E_v + E_c}{kT}}.$$

აქედან

$$\mu = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_p^*}{m_e^*}. \quad (6.36)$$

როდესაც $T=0$

$$2\mu = E_c + E_v \text{ ანდა } \mu - E_v = E_c - \mu = \frac{E_g}{2}.$$

მაშასადამე, $T=0$ ტემპერატურაზე ქიმიური პოტენციალი მდებარეობს აკრძალული ზონის შუაზე. როდესაც $T>0$, ქიმიური პოტენციალი მცირე სიდიდით ინაცვლებს ზევით ან ქვევით, იმისდა მიხედვით, როგორია ხვრელისა და ელექტრონის ეფექტური მასების შეფარდება. ზოგად შემთხვევაში ეს შეფარდება მცირედ განსხვავდება ერთისაგან, ამიტომ მათი შეფარდების ლოგარითში შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ. ამრიგად $T>0$ ტემპერატურაზე ქიმიური პოტენციალი მდებარეობს აკრძალული ზონის შუა წერტილში. თუ μ -ის ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (6.12) ფორმულაში, მივიღებთ:

$$n = p = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}.$$

2. n ტიპის ნახევარგამტარი. დონორების კონცენტრაცია იყოს N_d , აქედან N_d^- იონიზირებულია, N_d^+ - ნეიტრალური, ე. ი.

$$N_d = N_d^+ + N_d^- . \quad (6.37)$$

თუ საკუთარ გამტარებლობას მხედველობაში არ მივიღებთ, მაშინ კრისტალის ელექტრონეიტრალობის პირობა ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$n = N_d^+ .$$

ჩავსვათ n და N_d^+ -ის მნიშვნელობები (6.12) და (6.30) ფორმულებიდან:

$$N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}} = \frac{N_d}{1 + 2 e^{\frac{\mu - E_d}{kT}}} . \quad (6.38)$$

აქედან $e^{\frac{\mu}{kT}}$ -თვის მიიღება კვადრატული განტოლება, რომლის ამოხსნა გვაძლევს:

$$\mu = \mu(E_d, E_c, N_d, N_c, T).$$

განვიხილოთ (6.38) ფორმულის ორი კერძო შემთხვევა:

ა) დონორების რეზერვის შემთხვევა. დონორების დიდ კონცენტრაციაზე, ანდა დაბალ ტემპერატურაზე გვაქვს დონორების რეზერვი, ე. ი. დონორების დიდი ნაწილი ნეიტრალურია $N_d^+ \simeq N_d$ ანდა $N_d^+ \ll N_d$, თანახმად (6.30) დამოკიდებულებისა $N_d^+ \ll N_d$ ნიშნავს იმას, რომ

$$e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} \gg 1,$$

ანდა

$$\mu - E_d \gg kT,$$

ამიტომ (6.38) ფორმულის მნიშვნელში ერთიანი შეიძლება უგულებელვყუთ, ეს გვაძლევს:

$$\frac{\mu}{e k T} = \sqrt{\frac{N_d}{2 N_c}} \cdot e^{\frac{E_c + E_d}{2 k T}},$$

ქედან

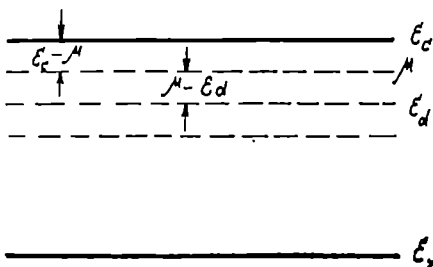
$$\mu = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{1}{2} k T \ln \frac{N_d}{N_c}. \quad (6.39)$$

როდესაც $T=0$, მაშინ $2\mu = E_c + E_d$
ანდა

$$\mu - E_d = E_c - \mu.$$

$\mu - E_d$ არის მანძილი ქიმიური პოტენციალიდან დონორის დონემდე, ხოლო $E_c - \mu$ — მანძილი გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირიდან ქიმიურ პოტენციალამდე (ნახ. 69).

მაშასადამე, $T=0$ ტემპერატურაზე ქიმიური პოტენციალი მდებარეობს დონორის დონესა და გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირის შუა წერ-



ნახ. 69.

ტილში, არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში $\frac{N_d}{N_c} \ll 1$, ამიტომ (6.39)

ფორმულის მეორე წევრი უარყოფითია, ამიტომ დონორების კონცენტრაციის შემცირებით ანდა ტემპერატურის გადიდებით, ქიმიური პოტენციალი დაბლა იწევს, გადადის დონორის დონეზე და დონორების ძალიან მალე ტემპერატურაზე, ანდა დაბალ კონცენტრაციაზე უახლოვდება აკრძალული ზონის შუა წერტილს. ფიზიკურად ეს ადვილი გასაგებია: მართლაც, დონორების კონცენტრაციის შემცირებით ანდა ტემპერატურის გადიდებით თანდათანობით ეუახლოვებით ნახევარგამტარის საკუთარ გამტარებლობას. ამ დროს, როგორც ზემოთ იყრ ნაჩვენები, ქიმიური პოტენციალი მდებარეობს აკრძალული ზონის შუა წერტილზე.

თუ (6.39) მნიშვნელობას შევითანთ (6.12) ფორმულაში, მივიღებთ

$$n = \sqrt{\frac{1}{2} N_c N_d} e^{-\frac{E_c - E_d}{2kT}},$$

მაგრამ $E_c - E_d$ არის მანძილი გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირიდან დონორის დონემდე, აღენიშნოთ ეს მანძილი E_d -თი (ე. ი. დონორის დონე ათვლილია E_c -დან), მაშინ

$$n = \sqrt{\frac{1}{2} N_c N_d} e^{-\frac{E_d}{2kT}}, \quad (6.40)$$

ბ) დონორების გამოფიტვის შემთხვევა. დონორების მეტი წილი იონიზირებულია. ე. ი. $N_d^+ \simeq N_d$. ამას ადგილი აქვს მაღალ ტემპერატურაზე ან დაბალ კონცენტრაციაზე დონორებისა. ეს პირობა, თანახმად (6.30) დამოკიდებულებისა, ნიშნავს $E_d - \mu \gg kT$. ამ შემთხვევაში მნიშვნელში $\frac{\mu - E_d}{kT}$ წევრის გადაგდება შეიძლება. ამრიგად, ელექტრონეიტრალობის პირობა გვაძლევს:

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}} = N_d^+ \simeq N_d,$$

აქედან

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = \frac{N_d}{N_c} e^{\frac{E_c}{kT}},$$

ანდა

$$\mu = E_c + kT \ln \frac{N_d}{N_c}. \quad (6.41)$$

ა) p ტიპის ნახევარგამტარი. აქცეპტორების კონცენტრაცია იყოს N_A . აქედან N_A^+ ნეიტრალურია (ე. ი. მასზე მოთავსებულია ხვრელები) და N_A^- —იონიზირებული (ე. ი. N_A^- აქცეპტორებზე ჩაჭერილია ელექტრონები ვალენტური ზონიდან).

$$N_A = N_A^+ + N_A^- \quad (6.42)$$

თუ კრისტალის საკუთარ გამტარებლობას მხედველობაში არ მივიღებთ, მაშინ კრისტალის ელექტრონეიტრალობის პირობა ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$p = N_A^-$$

თუ ამ უკანასკნელში შევიტანთ p და N_A^- -ს მნიშვნელობებს (6.12) და (6.33) ფორმულების მიხედვით, მივიღებთ:

$$N_v e^{\frac{E_v - \mu}{kT}} = \frac{N_A}{1 + 2e^{\frac{E_c - \mu}{kT}}}. \quad (6.43)$$

აქედან $e^{\frac{\mu}{kT}}$ -თვის მიიღება კვადრატული განტოლება, რომლის ამოხსნა გვაძლევს

$$\mu = \mu(E_c, N_v, N_A, T).$$

განვიხილოთ (6.43) ფორმულის ორი კერძო შემთხვევა.

ა) აქცეპტორების რეზერვის შემთხვევა, $N_A \simeq N_A$ ანდა $N_A \ll N_A$ ამას ადგილი აქვს აქცეპტორების დიდ კონცენტრაციაზე და დაბალ ტემპერატურაზე. თანახმად (6.33) ფორმულისა, $N_A \ll N_A$ ნიშნავს $E_c - \mu \gg kT$, ამ დროს (6.43) ფორმულაში მნიშვნელში ერთის გადაგდება შეიძლება, ეს გვაძლევს:

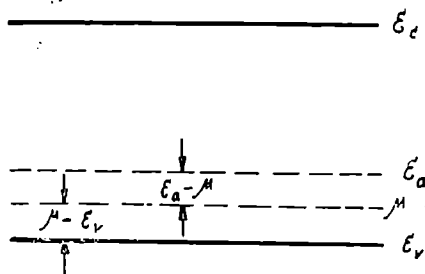
$$\mu = \frac{E_a + E_v}{2} + \frac{1}{2} kT \ln \frac{2N_v}{N_A}. \quad (6.44)$$

როდესაც $T=0$

$$2\mu = E_a + E_v \quad \text{ან} \quad \mu - E_v = E_a - \mu.$$

$E_a - \mu$ არის მანძილი ქიმიური პოტენციალიდან აქცეპტორის დონემდე, $\mu - E_v$ — მანძილი ქიმიური პოტენციალიდან ვალენტური ზონის ზედა ნაპირამდე (ნახ. 70).

მაშასადამე, $T=0$ ტემპერატურაზე ქიმიური პოტენციალი მდებარეობს აქცეპტორის დონესა და ვალენტური ზონის ზედა ნაპირის შუა წერტილში, თანახმად (6.44) ფორმულისა, ტემპერატურის გადიდებით ანდა აქცეპტორების კონცენტრაციის შემცირებით ქიმიური პოტენციალი იწევს ზევით. გადიდის აქცეპტორის დონეს და ძალიან მაღალ ტემპერატურაზე ანდა აქცეპტო-



ნახ. 70.

რების დაბალ კონცენტრაციაზე უახლოვდება აკრძალული ზონის შუა წერტილს. ეს ფიზიკურად ადვილი გასაგებია, რადგანაც ამ შემთხვევაში ჩვენ უახლოვდებით საკუთარი გამტარებლობის არეს. თუ μ -ს ზემოთ მიიღებულ მნიშვნელობას შევიტანთ (6.12) ფორმულაში, მივიღებთ

$$p = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{N_v}{N_A} e^{\frac{E_v - E_a}{2kT}}}.$$

$E_v - E_a$ — არის მანძილი ვალენტური ზონიდან აქცეპტორის დონემდე. თუ ენერგიას ავთვლით ვალენტური ზონის ქვედა ნაპირიდან, მაშინ $E_v - E_a = -E_a$. ამრიგად:

$$p = \sqrt{\frac{1}{2} N_A N_v} e^{\frac{-E_a}{2kT}}. \quad (6.45)$$

ბ) აქცეპტორების გამოფიტვის შემთხვევა $N_{\bar{A}} \simeq N_A$. ამას აღვიღო აქვს მაღალ ტემპერატურაზე და აქცეპტორების დაბალ კონცენტრაციაზე. $N_{\bar{A}} \simeq N_A$ თანახმად (6.33) ფორმულისა, ნიშნავს იმას,

რომ $e^{\frac{\mu - E_v}{kT}}$ მცირეა და შეიძლება მისი უგულებელყოფა. ამიტომ ელექტრონეიტრალობის პირობა გვაძლევს

$$p = N_v e^{\frac{E_v - \mu}{kT}} = N_A, \quad (6.46)$$

აქედან

$$\mu = E_v + kT \ln \frac{N_v}{N_A}.$$

1) ნახევარგამტარი დონორული და აქცეპტორული მინარევებით. ვთქვათ კრისტალში შეტანილია N_d დონორი და N_A აქცეპტორი. დონორებისა და აქცეპტორების ნაწილი იონიზირებულია, ნაწილი კი — ნეიტრალური. კიმიური პოტენციალი (ანდა ფერმის დონე) ყოველთვის განისაზღვრება კრისტალის ელექტრონეიტრალობის პირობიდან. ამ შემთხვევაში ელექტრონები გვაქვს გამტარებლობის ზონაში (μ) და აქცეპტორულ დონეებზე ($N_{\bar{A}}$), ხვრელები კი ვალენტურ ზონაში (p) და დონორებზე (N_d^+). ამიტომ კრისტალის ელექტრონეიტრალობის პირობა ჩაიწერება შემდეგი სახით

$$n + N_{\bar{A}} = p + N_d^+. \quad (6.47)$$

თუ ამ ფორმულაში შევითანთ n , p , $N_{\bar{A}}$ და N_d^+ -ს ზემოთ მოცემულ მნიშვნელობებს, მივიღებთ:

$$\frac{N_A}{1 + 2e^{\frac{E_a - \mu}{kT}}} + N_c e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = N_v e^{\frac{E_v - \mu}{kT}} + \frac{N_d}{1 + 2e^{\frac{\mu - E_d}{kT}}}. \quad (6.48)$$

ამ განტოლებიდან მოინახება $\mu = \mu(N_A, N_d, N_c, N_v, E_a, E_d, T)$.

(6.47) განტოლების ამოხსნა ზოგად შემთხვევაში რთულია, ამიტომ ზოგადი ანალიზისათვის შემდეგნაირად ვიქცევით: რომ გვქონოდა დონორული ნახევარგამტარი, მაშინ კიმიური პოტენციალი იქნებოდა გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირის მახლობლად. რომ გვქონოდა მხოლოდ აქცეპტორული ნახევარგამტარი, მაშინ კიმიური პოტენციალი იქნებოდა

ზონის ქვედა ნაპირის მახლობლად. დაეუშვათ, რომ $N_d \gg N_A$, მაშინ ქიმიური პოტენციალი ქვევით დაიწვევა, მაგრამ იგი მაინც გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირთან უფრო ახლოს იქნება, ვიდრე ვალენტური ზონის ზედა ნაპირიდან, და ასევე აქცეპტორის დონიდან, ე. ი.

$$\mu - E_d \gg kT \text{ და } \mu - E_v \gg kT,$$

მაშინ

$$p = N_v l^{\frac{\mu - E_v}{kT}} \rightarrow 0 \text{ და } N_A \bar{A} = \frac{N_A}{\frac{E_d - \mu}{kT}} \simeq N_A.$$

თუ ამ მნიშვნელობებს შევითანთ (6.47) ტოლობაში, მივიღებთ:

$$n = N_d^+ - N_A. \quad (6.49)$$

მიღებული ფორმულის შინაარსი ასეთია: $N_A \bar{A} \simeq N_A$ ნიშნავს იმას, რომ აქცეპტორული დონეები მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით, ეს ადვილი გასაგებია. რადგანაც, როგორც წესი, დონორული დონეები უფრო ზევით მდებარეობენ, ვიდრე აქცეპტორული დონეები, ამიტომ ელექტრონებისათვის უფრო ხელსაყრელია გადავიდეს მაღალი ენერგიული დონიდან დაბალზე. შედეგად ამისა აქცეპტორული დონეები მთლიანად შეივსება ელექტრონებით. აქცეპტორები რომ არ გვექნოდა, მაშინ გამტარებლობის ზონაში გვექნებოდა N_d^+ ელექტრონები, მაგრამ რადგანაც დონორული დონიდან აქცეპტორის დონეზე გადასულია $N_A \bar{A} \simeq N_A$ ელექტრონები, ამიტომ გამტარებლობის ზონაში ელექტრონების რიცხვი შემცირდება და გახდება $N_d^+ - N_A$ -ს ტოლი. მაშასადამე, დონორულ ნახევარგამტარში აქცეპტორების დამატება $N_d > N_A$ გვაძლევს დონორების ნაწილობრივ კომპენსაციას, რის შედეგად ელექტრონული გამტარობა მცირდება. სრულიად ანალოგიურ მდგომარეობას აქვს ადგილი, როდესაც აქცეპტორულ ნახევარგამტარში შეგვაქვს დონორები $N_d < N_A$. ამ დროს ქიმიური პოტენციალი (ფერმის დონე) ვალენტური ზონის ნაპირიდან და ასევე აქცეპტორის დონიდან უფრო ახლოს მდებარეობს, ვიდრე გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირიდან და ასევე დონორის დონიდან, ე. ი.

$$E_c - \mu \gg kT \text{ და } E_d - \mu \gg kT.$$

ამიტომ

$$n = N_c l^{\frac{\mu - E_c}{kT}} \rightarrow 0$$

და

$$N_d^+ = \frac{N_d}{1 + 2e^{\frac{\mu - E_d}{kT}}} \simeq N_d.$$

ამ შემთხვევაში ელექტრონეიტრალობის პირობა გვაქვს

$$p = N_{\bar{A}} - N_d. \quad (6.50)$$

რომ გვეჩვენოს მხოლოდ აქცეპტორები, მაშინ ვალენტურ ზონაში ხერელების რიცხვი იქნებოდა $N_{\bar{A}}$. დონორების დამატებისას, დონორული დონეებიდან N_d ელექტრონები გადავლენ ვალენტურ ზონაში ანდა, რაც იგივეა, აქცეპტორულ დონეებზე, ამიტომ სავალენტო ზონაში ხერელების რიცხვი შემცირდება და გახდება $N_{\bar{A}} - N_d$ -ს ტოლი. მაშასადამე, p ტიპის ნახევარგამტარში დონორების დამატება იწვევს აქცეპტორების ნაწილის კომპენსაციას, რის შედეგად კრისტალის ხერელური გამტარებლობა მცირდება. როდესაც $N_d = N_A$, მოხდება სრული კომპენსაცია $n = p = 0$. ამ შემთხვევაში მინარევული გამტარებლობა ნულის ტოლია.

არაწონასწორობული პროცესები

§ 1. ღენის მატარებელთა გენეზისი და რეკომბინაცია

კრისტალის ყოველ ტემპერატურაზე სითბური ფლუქტუაციის შედეგად ადგილი აქვს მინარევი ატომებისა და ასევე მესერის რეგულარული ატომების ნაწილის იონიზაციას, ელექტრონ-ხვრელის წარმოქმნას. ზონური სურათის მიხედვით ეს ნიშნავს ელექტრონების გადასვლას მინარევის დონიდან და ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში და იმდენივე ხვრელის გაჩენას მინარევის დონეზე და ვალენტურ ზონაში. იონიზაციის პარალელურად ყოველთვის მიმდინარეობს შებრუნებული პროცესი ელექტრონ-ხვრელის შეერთება-რეკომბინაცია. კრისტალის ყოველ ტემპერატურაზე ამ ორი; ერთმანეთის საწინააღმდეგოდ მიმართული პროცესების შედეგად მყარდება წონასწორობა. ამ დროს სითბური იონიზაციის შედეგად გაჩენილი წყვილების (ელექტრონ-ხვრელი) რაოდენობა უდრის რეკომბინაციის შედეგად გაქრობილი წყვილების რაოდენობას. თუ სითბური წონასწორობის შესაბამის ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაციას შესაბამისად აღვნიშნავთ n_0 და p_0 , მაშინ

$$g_0 = \gamma n_0 p_0, \quad (7.1)$$

სადაც g_0 არის წყვილების რიცხვი, რომელიც წარმოიშობა სითბური ფლუქტუაციის შედეგად კრისტალის 1 სმ³ მოცულობაში 1 წმ-ის განმავლობაში, $\gamma n_0 p_0$ —ამავე დროში რეკომბინირებული წყვილების რიცხვი, γ —რეკომბინაციის კოეფიციენტი.

ელექტრონებისა და ხვრელების წონასწორობული რიცხვი შეიძლება შეიცვალოს გარეგანი ფაქტორების, მაგალითად ფოტონების მოქმედებით. ამისათვის საჭიროა დაცემული ფოტონების ენერგია იყოს მეტი ან ტოლი რეგულარული ატომისა, ანდა მინარევი ატომის იონიზაციის ენერგიაზე. ყოველი ასეთი ფოტონი წარმოშობს დამატებით წყვილს—ელექტრონ-ხვრელს და ამრიგად იზრდება ღენის მატარებელთა კონცენტრაცია, მეორე

მხრივ, დენის მატარებელთა კონცენტრაციის გადიდებისას იზრდება აგრეთვე შებრუნებული პროცესი—რეკომბინაცია. ამიტომ, თუ სინათლის (ფოტონების) მოქმედება საკმარისად დიდხანს გრძელდება, ამ ორი საწინააღმდეგოდ მიმართული პროცესების შედეგად დამყარდება ახალი წონასწორობა, რომელსაც ეთანადება n_0 და p_0 -საგან განსხვავებული კონცენტრაციები n და p . ეს უკანასკნელი კი დამოკიდებულია დაცემული სხივების ინტენსივობაზე.

თუ მოვხსნით გარეგან ფაქტორს (მაგ. გაშუქებას), მაშინ რეკომბინაციის შედეგად ნაწილაკთა რიცხვი შემცირდება და გარკვეული დროის შემდეგ გაუტოლდება სითბური წონასწორობის შესაბამის n_0 და p_0 კონცენტრაციას. ნაწილაკთა რიცხვის ცვლილება რეკომბინაციის შედეგად ჩაიწერება შემდეგი სახით

$$-\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{რკ}} = \gamma np - \gamma n_0 p_0 = \gamma (np - n_0 p_0). \quad (7.2)$$

რადგანაც $n, p > n_0, p_0$, ამიტომ $\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{რკ}} < 0$.

ეს უტოლობა აღნიშნავს იმას, რომ რეკომბინაცია სჭარბობს გენერაციას. მაგრამ, თუ კრისტალის რომელიმე უბანზე რაიმე მიზეზის გამო შეიქმნა

n_0 და p_0 -ზე ნაკლები კონცენტრაცია $n, p < n_0, p_0$, მაშინ $\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{რკ}} > 0$,

ე. ი. კრისტალის ალბეზულ უბანზე სითბური გენერაცია სჭარბობს რეკომბინაციას, ამიტომ გარკვეული დროის შემდეგ აღდგება სითბური წონასწორობის შესაბამისი კონცენტრაცია n_0 და p_0 .

დავუშვათ, რომ n და p მცირედ არის განსხვავებული n_0 და p_0 -საგან, ე. ი.

$$n = n_0 + \Delta n \quad \text{და} \quad p = p_0 + \Delta p \quad (\Delta n = \Delta p)$$

მაშინ (1.2) განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს

$$-\frac{d}{dt}(\Delta n) \cong \gamma (n_0 + p_0) \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau}, \quad (7.3)$$

სადაც

$$\frac{1}{\tau} = \gamma (n_0 + p_0).$$

(7.3) განტოლების ამოხსნაა

$$\Delta n(t) = (\Delta n)_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (7.4)$$

მაშასადამე, გარეგანი ფაქტორის მოხსნის შემდეგ ჰარბი კონცენტრაცია ეცემა ექსპონენციალური კანონით. τ პარამეტრს ეწოდება დენის მატარე-

ბელთა სიცოცხლის ხანგრძლივობა და წარმოდგენს დროის იმ ინტერვალს, რომლის განმავლობაში ჰარბი კონცენტრაცია ეცემა e -ჯერ.

ნახევარგამტარებში რეკომბინაციის პროცესების მიახლოებითი აღწერაც კი ძალზე რთულ ამოცანას წარმოადგენს. მიუხედავად ამისა, მათი მიახლოებითი განხილვა დიდ ყურადღებას იპყრობს იმის გამო, რომ მთელი რიგი ნახევარგამტარული ხელსაწყოების მუშაობის პრინციპი დამყარებულია რეკომბინაციულ მოვლენებზე, მთელ რიგ ნახევარგამტარებში (მცირე სიდიდის აკრძალული ზონის მქონე კრისტალებში) ელექტრონისა და ხვრელის რეკომბინაცია წარმოებს უშუალოდ. ამ დროს ერთდროულად ქრება ორი ნაწილაკი ელექტრონ-ხვრელი. აქ შესაძლებელია ორი შემთხვევა: 1) როდესაც გამჭრალი წყვილის ენერგია გადაეცემა მესერს, 2) ენერგია გამოიყოფა სინათლის სახით. პირველ შემთხვევაში საქმე გვაქვს არაგამოსხივებად, ხოლო მეორე შემთხვევაში—გამოსხივებად გადასვლებთან. ამ საკითხს ცალკე განვიხილავთ უფრო დეტალურად.

§ 2. რეკომბინაცია ჩამჭერი ცენტრებში. უიკალი-რეზონანსის მემანნიშვნო

ზოგიერთ ნახევარგამტარში გამტარებლობის ელექტრონისა და სავალენტო ხვრელის რეკომბინაცია ხდება არა უშუალოდ, არამედ ჩამჭერი ცენტრების მეოხებით. გამტარებლობის ელექტრონი ჯერ ჩაიჭირება ჩამჭერი ცენტრის მიერ, რის შემდეგაც ეს უკანასკნელი დაიმუხტება უარყოფითად. თავის მხრივ უარყოფითად დამუხტულ ნაწილაკს აქვს დიდი ეფექტური კვეთა—ჩაიჭიროს ხვრელი. საბოლოო ანგარიშში გაქრება ერთი გამტარებლობის ელექტრონი და ერთი სავალენტო ხვრელი. პირდაპირი ანუ უშუალო რეკომბინაციის შემთხვევაში ელექტრონისა და ხვრელის სიცოცხლის ხანგრძლივობა ერთმანეთის ტოლია $\tau_n = \tau_p = \tau$. მაგრამ როდესაც რეკომბინაცია წარმოებს ჩამჭერი ცენტრების საშუალებით, მაშინ ცხადია, რომ $\tau_n \neq \tau_p$. რეკომბინაციის თეორია ჩამჭერი ცენტრებზე დამუშავებულ იქნა შოკლისა და რიდის მიერ. ქვემოთ მოგვყავს შოკლისა და რიდის თეორია გამარტივებული სახით.

აღნიშნოთ N_t -თი ჩამჭერი ცენტრების სიმკვრივე, N_t^- —ჩამჭერი ცენტრის სიმკვრივე, რომელზედაც ჩაჭერილია ელექტრონები ვალენტური ზონიდან, მაშინ $N_t - N_t^-$ იქნება ჩამჭერი ცენტრების კონცენტრაცია, რომელზედაც არ არიან ჩაჭერილი ელექტრონები, ანდა რაც იგივეა, მოთავსებულია ხვრელები. ელექტრონების ჩაჭერის სიჩქარე დაიწერება შემდეგი სახით

$$\gamma_{n\tau} (N_t - N_t^-) = \gamma_{n\tau} N_{t0} (1 - f_t),$$

სადაც $f_t = N_t^- / N_t$ წარმოადგენს ჩამჭერი ცენტრების ელექტრონებით შევსების ხარისხს, სიბუთრი გენერაციის სიჩქარე ტოლია $\beta N_t^- = \beta N_{t0} f_t$.

ამრიგად, გამტარებლობის ელექტრონების ცვლილება რეკომბინაციის შედეგად იქნება

$$-\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{კვ.}} = \gamma_n N_t n (1-f_t) - \beta N_t f_t, \quad (7.5)$$

სითბური წონასწორობის შემთხვევაში

$$\gamma_n N_t n_0 (1-f_t^0) - \beta N_t f_t^0 = 0.$$

ამ პირობიდან განვსაზღვრავთ β კოეფიციენტის მნიშვნელობას

$$\beta = \gamma_n n_0 \frac{1-f_t^0}{f_t^0} = \gamma_n n_0 e^{-\frac{E_t + \mu}{kT}} = \gamma_n \cdot n_1, \quad (7.6)$$

სადაც

$$n_1 = N_c e^{-\frac{E_t}{kT}}.$$

n_1 არის ელექტრონების კონცენტრაცია იმ შემთხვევაში, როდესაც ფერმის დონე გადის რეკომბინაციის ცენტრების ენერგეტიკულ დონეზე* $E_t = -\mu$.

თუ β -ს მნიშვნელობას შევიტანთ (1.5) ფორმულაში, მივიღებთ:

$$-\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{კვ.}} = \gamma_n N_t [n (1-f_t) - n_1 f_t] \quad (7.7)$$

სრულიად ანალოგიურად მიიღება ფორმულა სავალენტო ხვრელების ცვლილებისათვის

$$-\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\text{კვ.}} = \gamma_p N_t [p f_t - p_1 (1-f_t)], \quad (7.8)$$

სადაც γ_p არის ხვრელების რეკომბინაციის კოეფიციენტი ჩამჟვრ ცენტრებზე.

* ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქციაში $f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}$, თუ შევიტანთ

$E \rightarrow -E_t$ -ს, მივიღებთ ჩამჟვრ დონეებზე ელექტრონების განაწილების კანონს

$$f_t^0 = \frac{1}{e^{\frac{E_t + \mu}{kT}} + 1},$$

ამიტომ

$$\frac{1-f_t^0}{f_t^0} = e^{-\frac{E_t + \mu}{kT}}.$$

$p_1 = N_1 e^{-\frac{E_g - E_t}{kT}}$ არის ხერელების კონცენტრაცია, როდესაც ფერმის დონე გადის E_t -ზე. (6.7) იძლევა ერთ წამში გამტარებლობის ზონიდან ჩამქერ ცენტრებზე ჩაქერილი ელექტრონების რიცხვს, ხოლო (7.8) — სავალენტო ზონიდან ჩაქერილი ხერელების რიცხვს. საზოგადოდ, ეს რიცხვები ერთმანეთის ტოლი არ არის, ე. ი. ჩამქერ ცენტრებზე შეიძლება აღდგოლი ჰქონდეს ელექტრონების ან ხერელების დაგროვებას, რაც პრაქტიკულად ხდება, ე. ი. დროის ერთეულში ჩამქერი ცენტრი იჭერს ელექტრონებისა და ხერელების თანაბარ რაოდენობას. ამრიგად,

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{ავ.}} = \left(\frac{dp}{dt}\right)_{\text{ავ.}}$$

ანდა

$$\gamma_n N_t (n(1-f_t) - n_1 f_t) = \gamma_p N_t (p f_t - p_1(1-f_t)).$$

აქედან

$$f_t = \frac{\gamma_n n + \gamma_p p}{\gamma_n(n+n_1) + \gamma_p(p+p_1)}.$$

თუ f_t -ს ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (6.5) ფორმულაში, საბოლოოდ გვექნება:

$$-\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{ავ.}} = \frac{\gamma_n \gamma_p N_t (np - n_1 p_1)}{\gamma_n(n+n_1) + \gamma_p(p+p_1)}. \quad (7.9)$$

თუ მხედველობაში მივიღებთ, რომ

$$n_1 p_1 = n_i^2 = n_0 p_0 \quad \text{და} \quad np - n_0 p_0 \simeq \Delta n (n_0 + p_0)$$

და ვისარგებლებთ ფორმულით

$$-\left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{ავ.}} = \frac{\Delta n}{\tau},$$

მივიღებთ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\Delta n} \left(\frac{dn}{dt}\right)_{\text{ავ.}} = \frac{\gamma_n \gamma_p N_t (n_0 + p_0)}{\gamma_n(n+n_1) + \gamma_p(p+p_1)}. \quad (7.10)$$

ძლიერად ლევირებულ n ნახევარგამტარებში, როდესაც

$$n \simeq n_0 \gg n_1, \quad n_0 \gg p_0 \quad \text{და} \quad n_0 \gg p = p + \Delta p$$

(7.10)-დან მივიღებთ

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{1}{\tau_p^0} \simeq \gamma_p N_t. \quad (7.10a)$$

ანალოგიურად ძლიერად ლევირებულ p ნახევარგამტარებში, როდესაც

$$p \simeq p_0 \gg p_1, \quad p_0 \gg n_0 \quad \text{და} \quad p_0 \gg n = n_0 + \Delta n$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_n^0} = \gamma_n N_i, \quad (7.10b)$$

საბოლოოდ ფორმულა (6.10) მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\tau = \frac{\tau_p^0 (n + n_1) + \tau_n^0 (p + p_1)}{n_0 + p_0}. \quad (7.11)$$

თანახმად ამ ფორმულისა, τ ლებულობს მაქსიმალურ მნიშვნელობას, როდესაც $n_0 = p_0 = 0$

$$\tau = \tau_i = \frac{\tau_p^0 n_1 + \tau_n^0 p_1}{2n_1} \quad (n \ll n_1 \text{ და } p \ll p_1). \quad (7.12)$$

მაშასადამე, სიცოცხლის ხანგრძლივობა τ_i საკუთარ ნახევარგამტარებში ყოველთვის მეტია, ვიდრე τ_n^0 და τ_p^0 . ძირითადი მატარებლების კონცენტრაციის გადიცებით τ ეცემა. განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც Δn დიდია, მაშინ

$$pn - p_0n_0 = \Delta n (n_0 + p_0 + \Delta n).$$

სიცოცხლის ხანგრძლივობისათვის გვექნება

$$\tau = \frac{\tau_p^0 (n + n_1) + \tau_n^0 (p + p_1)}{n_0 + p_0 + \Delta n}. \quad (7.13)$$

როდესაც $\Delta n \gg n_0, p_0, n_1, p_1$, მაშინ τ დამოკიდებული არ არის ღენის მატარებლების კონცენტრაციაზე და უდრის

$$\tau_n = \tau_n^0 + \tau_p^0. \quad (7.14)$$

მაშასადამე, ღენის მატარებელთა როგორც მცირე ისე დიდ კონცენტრაციებზე რეკომბინაციას აქვს ექსპონენციალური ხასიათი. პირდაპირი რეკომბინაციის შემთხვევაში, როგორც ამას ქვემოთ ვუჩვენებთ, ღენის მატარებელთა დიდ კონცენტრაციებზე რეკომბინაცია მიმდინარეობს ჰიპერბოლური კანონით.

§ 3. რეკომბინაცია რამდენიმე ტიპის ჩამჟვარი ცენტრების არსებობის შემთხვევაში

როდესაც ნახევარგამტარში გვაქვს რამდენიმე ტიპის ჩამჟვარი ცენტრები, მაშინ ნაწილაკთა რიცხვის ცვლილება ზონაში და ჩამჟვარ ცენტრებზე გამოისახება შემდეგი განტოლებათა სისტემით:

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= g + \sum \beta_i n_i - \sum \sigma_i v (N_i - n_i) n - \sigma_{vn} p \\ \frac{dn_i}{dt} &= \beta_i n_i + \sigma_i v (N_i - n_i) n \quad i = 1, 2, \dots \\ \frac{dp}{dt} &= g - \sigma_{vn} p \quad g = g_0 + g_1 \end{aligned} \quad (7.15)$$

პირველი განტოლება აღწერს ელექტრონების რიცხვის ცვლილებას გამტარებლობის ზონაში, მეორე—ჩამკერ ცენტრებზე და მესამე—ხვრელების რიცხვის ცვლილებას ვალენტურ ზონაში. g_1 —არის წყვილების რიცხვი, რომელსაც წარმოშობს ფოტონები მოცულობის ერთეულში ერთ წამში $g_1 = \beta n I$, სადაც I არის სინათლის ინტენსივობა, k — სინათლის შთანთქმის კოეფიციენტი და β —კვანტური გამოსავალი, ე. ი. გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვი, რომელიც მოდის სინათლის ერთ კვანტზე. $\beta_1 n_1$ არის გამტარებლობის ელექტრონების რიცხვი, რომელიც წარმოიშობა სითბური ფლუქტუაციის შედეგად i -ური დისკრეტული ღონიდან, $\sigma_1 v (N_1 - n_1) n$ არის რეკომბინაციათა რიცხვი i -ურ ღონეზე დროის ერთეულში, $\sigma_i = \frac{\gamma_i}{v}$ არის ჩაქერის ეფექტური კვეთი i -ურ ღონეზე,

N_1 —ჩამკერი ცენტრების კონცენტრაცია i -ურ ღონეზე, n —გამტარებლობის ელექტრონებისა და p სავალენტო ხვრელების სიმკვრივე. განვიხილოთ რამდენიმე კერძო შემთხვევა:

1. უშუალო რეკომბინაციაა გამტარებლობის ელექტრონებისა სავალენტო ხვრელებთან, მინარევული ატომების მონაწილეობის გარეშე $n_i = 0$. ამ შემთხვევაში $n = p$ და (7.15) განტოლებათა სისტემა დადის ერთ განტოლებაზე

$$\frac{dn}{dt} = g - \gamma n^2 = g_i - \gamma (n^2 - n_0^2), \quad (7.16)$$

(7.16) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს შემდეგი ფუნქცია

$$n(t) = n_\infty \left(\frac{2}{1 + C e^{-t/\tau}} - 1 \right), \quad (7.17)$$

სადაც $n_\infty = \sqrt{n_0^2 + g_i/\gamma}$ არის სტაციონარული კონცენტრაცია ელექტრონებისა, რომელიც მყარდება დიდი ხნით გაშუქების შედეგად, n_0 —გამტარებლობის ელექტრონების საწყისი კონცენტრაცია,

$$C = - \frac{n_\infty - n_0}{n_\infty + n_0}$$

და

$$\frac{1}{\tau} = 2\gamma \sqrt{n_0^2 + g_i/\gamma} \sim \sqrt{I}.$$

დავუშვათ, რომ სტაციონარული კონცენტრაციის n_∞ -ს მიღწევის შემდეგ გამოვთიშეთ სინათლე ($g_i = 0$), ამ დროს რეკომბინაცია სპარბობს სითბურ გენერაციას, ამიტომ გარკვეული დროის შემდეგ დამყარდება

წონასწორობა, რომელიც ეთანადება სითბურ გენერაციას. რელაქსაციის ეს პროცესი აიწერება შემდეგი კანონით

$$\frac{dn}{dt} = -\gamma (n^2 - n_0^2). \quad (7.18)$$

ჩვენ ვეძებთ ამ განტოლების ამოხსნას შემდეგი საწყისი პირობების გათვალისწინებით: როდესაც $t=0$, $n=n_0$. ამოხსნას აქვს შემდეგი სახე

$$\frac{n-n_0}{n+n_0} = C e^{-t/\tau_c}, \quad (7.19)$$

სადაც

$$1/\tau_c = 2\gamma n_0$$

და

$$C = \frac{n_\infty - n_0}{n_\infty + n_0}, \quad (7.20)$$

დავუშვათ, რომ n_∞ მცირედ არის განსხვავებული n_0 -გან, მაშინ

$$n - n_0 \simeq \Delta n(t) \text{ და } C = \frac{\Delta n \tau_c}{2n_0}.$$

ამ მნიშვნელობების ჩასმა (6.19)-ში გვაძლევს

$$\Delta n(t) = \Delta n_{ATE} e^{-t/\tau_c},$$

რაც ემთხვევა წინათ მიღებულ ფორმულას (7.4)

2. რეკომბინაცია დონორებზე. დონორების სიმკვრივე აღვნიშნოთ N_d -თი. ვთქვათ, I ინტენსივობის სინათლით გაშუქებთ დონორის დონიდან. ვალენტური ზონიდან გაშუქების შემთხვევაში ყოველ წამში სინათლე იძლეოდა $g_1 = \beta kT$ წყვილს, რადგანაც ელექტრონების მარაგი სავალენტო ზონაში ძალიან დიდია. როდესაც გაშუქებთ დონორის დონიდან, ამ უკანასკნელის თანდათანობით გამოფიტვის გამო, სინათლის კვანტებით შექმნილი წყვილების რიცხვი პროპორციული იქნება აღებულ მომენტში დონორებზე მოთავსებული ელექტრონების რიცხვისა, ე. ი.

$$g_1 = \bar{g} n_1 \quad (\bar{g} \sim I),$$

ასევე სითბური ფლუქტუაციის შედეგად შექმნილი წყვილები იქნება βn_1 , სადაც $n_1 = N_d - n$. ამ შემთხვევაში განტოლებათა სისტემა (6.15) დაიყვანება ერთ განტოლებაზე

$$\frac{dn}{dt} = (\bar{g} + \beta) (N_d - n) - \gamma n^2, \quad (7.21)$$

ანდა

$$\frac{dn}{dt} = a - bn - \gamma n^2, \quad (7.22)$$

სადაც

$$a = (\bar{g} + \beta) N_d \text{ და } b = \bar{g} + \beta.$$

(7.22) განტოლების ამოხსნა წარმოადგენს

$$\frac{n - n_{\infty}}{n + n_{\infty} + b/\gamma} = C e^{-t/\tau}, \quad (7.23)$$

სადაც

$$\frac{1}{\tau} = \sqrt{b^2 + 4a\gamma} = b + 2\gamma n_{\infty} \quad (7.24)$$

და

$$C = - \frac{n_{\infty} - n_0}{n_{\infty} + n_0 + b/\gamma} \quad (7.25)$$

განისაზღვრება შემდეგი განტოლებიდან

$$\gamma n_{\infty}^2 + b n_{\infty} - a = 0.$$

სინათლის გამორთვის შემდეგ ($\bar{g} = 0$) დენის მატარებელთა რელაქსაცია მოიცემა ფორმულით

$$\frac{dn}{dt} = \beta (N_d - n) - \gamma n^2 \quad (7.26)$$

ეს განტოლება უნდა ამოიხსნას შემდეგი საწყისი პირობების გათვალისწინებით: როდესაც $t = 0$, $n = n_{\infty}$. ამოხსნას წარმოადგენს შემდეგი ფუნქცია

$$\frac{n - n_0}{n + n_0 + b/\gamma} = C e^{-t/\tau_c} \quad (7.27)$$

სადაც

$$C = \frac{n_{\infty} - n_0}{n_{\infty} + n_0 + b/\gamma} \quad (7.28)$$

და

$$\frac{1}{\tau_c} = \sqrt{\beta^2 + 4\beta\gamma N_d}.$$

რადგანაც

$$\beta/\gamma = \frac{n_0^2}{N_d - n_0} \simeq \frac{n_0^2}{N_d},$$

ამიტომ

$$\frac{1}{\tau_c} = 2\gamma n_0 \sqrt{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{n_0}{N_d} \right)^2} \simeq 2\gamma n_0 \quad (n_0 \ll N_d).$$

ამრიგად დონორების სინათლით მცირე აღგზნების შემთხვევაში $n - n_0 = \Delta n \ll n_0$, რელაქსაცია მიმდინარეობს (7.4) კანონის მიხედვით.

3. რეკომბინაცია დონორებზე, როდესაც დონორები ნაწილობრივ კომპენსირებულია $N_A < N_d$ აქცეპტორე-

ბი თ. როგორც ვიცით, დონორულ ნახევარგამტარში, რომელშიც შეტანილია $N_A < N_d$ აქცეპტორები, დონორის დონიდან აქცეპტორის დონეზე გადადიან N_A ელექტრონები და ასეთივე რაოდენობის ზერელებს ტოვებენ დონორულ დონეებზე. თუ დროის რომელიმე მომენტში ზონაში გვაქვს n ელექტრონი, მაშინ დონორებზე გვექნება $N_d - N_A - n$ ელექტრონი, ამიტომ დონორის დონიდან სინათლით გაშუქებისას გამტარებლობის ზონაში ელექტრონების რიცხვის ცვლილება მოცემული გვექნება შემდეგი განტოლებით

$$\frac{dn}{dt} = (\bar{g} + \beta)(N_d - N_A - n) - \gamma n(N_A + n). \quad (7.29)$$

ეს უკანასკნელი (7.22) ტიპის განტოლებაა, სადაც

$$u = (\bar{g} + \beta)(N_d - N_A) \quad (7.30)$$

და

$$b = \bar{g} + \beta + \gamma N_A$$

გაშუქების მოხსნის შემდეგ ($\bar{g} = 0$) რეკომბინაციის შედეგად ნაწილაკთა რიცხვის ცვლილება მოცემული იქნება (7.19) ფორმულით, სადაც

$$\frac{1}{\tau_c} = \sqrt{(\beta + \gamma N_A)^2 + 4\beta\gamma(N_d - N_A)} \simeq \gamma(N_A + 2n_0) \simeq \gamma N_A.$$

(როდესაც $N_A \gg n_0$). ეს უკანასკნელი შემთხვევა შოკლი-რიდის ფორმულას ემთხვევა (7.10 a, b).

ჩვენ ზემოთ განვიხილეთ განტოლებათა სისტემის (7.15) ზოგიერთი კერძო შემთხვევის ამოხსნა. ზოგად შემთხვევაში მათი ამოხსნა, განტოლებათა სისტემის ანაწარფივობის გამო, დაკავშირებულია დიდ მათემატიკურ სირთულესთან, ამიტომ მთელი რიგი ავტორები ეძებენ ამ განტოლებათა ამოხსნას მიახლოებით, განტოლებათა სისტემის გაწარფივების გზით.

§ 4. ზედპირული რეკომბინაცია

კრისტალის ზედაპირზე მუდამ გვაქვს გარკვეული რაოდენობის დისკრეტული ენერგეტიკული დონეები, რომლებიც წარმოადგენენ ელექტრონებისა და ზერელების ჩამკერ ცენტრებს. ასე მაგალითად, ტამმა გვიჩვენა, რომ კრისტალის ზედაპირზე მესერის პერიოდული ველის დაძახინების შედეგად ზედაპირული ატომები ქმნიან ლოკალურ დონეებს, რომლებიც მოთავსებულია აკრძალულ ზონაში და ჩამკერი ცენტრების როლს ასრულებენ. გარდა ამისა, კრისტალის ზედაპირზე შეიძლება გვექონდეს აბსორბირებული ატომები, რომელთა დიდი ნაწილი იონიზირებულია და წარმოადგენენ აგრეთვე ელექტრონებისა და ზერელების ჩამკერ ცენტრებს. საზოგადოდ, ელექტრონებისა და ზერელების უშუალო რეკომბინაციას ან

რეკომბინაციას ჩამკერ ცენტრებზე ადგილი აქვს როგორც მოცულობაში, ისე ზედაპირზე. საერთოდ მოცულობითი რეკომბინაცია მუდამ კარბობს ზედაპირულ რეკომბინაციას, მაგრამ ძალიან თხელი ნახევარგამტარული ფირების შემთხვევაში ზედაპირული რეკომბინაციის უგულებელყოფა შეუძლებელია. ნახევარგამტარულ ოხელ ფირებს ფართო გამოყენება აქვს ნახევარგამტარულ ხელსაწყოებში. ამიტომ ზედაპირული რეკომბინაციის შესწავლას პირველხარისხოვანი მნიშვნელობა ეძლევა. ამ შემთხვევაში ძალაში რჩება ყველა ფორმულა, რომელიც მიღებული იყო მოცულობითი რეკომბინაციის განხილვის დროს, მხოლოდ მოცულობითი კონცენტრაციის ნაცვლად ყველგან გვექნება ზედაპირული კონცენტრაცია. ამიტომ ამ საკითხის ცალკე განხილვას აზრი არა აქვს.

§ 5. ფეჰმის კვაზი-დონეები

სითბური წონასწორობის შემთხვევაში ელექტრონებისა და ხერელების კონცენტრაცია მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$\begin{aligned} n_0 &= N_c e^{-\mu/kT}, \\ p_0 &= N_v e^{-\frac{E_g - \mu}{kT}}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

აქ μ ათვლილია გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდიდან. როდესაც ნახევარგამტარში გაშუქებით ან სწრაფი ნაწილაკების დაშენით წარმოიქმნებიან დენის დამატებითი მატარებლები, მათ თავდაპირველად (წარმოშობის მომენტში) უფრო მეტი ენერგია გააჩნიათ, ვიდრე საშუალო სითბური ენერგია kT . მაგრამ, დაახლოებით $10^{-10} \rightarrow 10^{-11}$ წმ-ის განმავლობაში, ისინი მესერთან დაჯახების გამო კარგავენ თავიანთ კარბ ენერგიას და ამრიგად გადადიან სითბური წონასწორობის მდგომარეობაში, სადაც დენის კარბ მატარებელთა სიცოცხლის ხანგრძლივობა $\sim 10^{-7} \rightarrow 10^{-9}$ წმ-ია. მაშასადამე, სანათლის მოქმედებით (ან სხვა ფაქტორებით) წარმოშობილი დენის დამატებითი მატარებლები თავიანთი არსებობის უმეტეს დროს სითბურ წონასწორობაში არიან მესერთან. სითბურ წონასწორობაში ნყოფ ნაწილაკთა რიცხვი მოიცემა ბოლცმანის ფორმულით (თუ გაზი გადაგარებული არ არის)

$$n = N_c e^{-\frac{\mu_n}{kT}} \quad (7.32)$$

და

$$p = N_v e^{-\frac{\mu_p}{kT}} \quad (\mu_p = E_g - \mu_n).$$

μ_n და μ_p ეწოდება ფერბის კვაზი-დონეები ელექტრონებისა და ხერელეებისათვის, სათანადოდ. თანახმად (7.31) და (7.32) ფორმულებისა

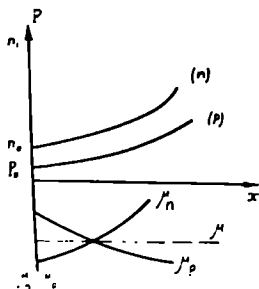
$$\mu - \mu_n = kT \ln \frac{n}{n_0}$$

და

(7.33)

$$\mu - \mu_p = kT \ln \frac{p}{p_0}$$

როდესაც $n \gg n_0$, მაშინ $\mu_n < \mu$. ამ შემთხვევაში ფერმის კვაზი-დონე უახლოვდება გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეს და პირიქით, როდესაც



ნახ. 71.

$n < n_0$, μ_n შორდება ; გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეს. სრულიად ანალოგიურად, როდესაც $p > p_0$, მაშინ $\mu_p > \mu$ ე. ი. μ_p უახლოვდება სავალენტო ზონის ზედა კიდეს და პირიქით, როდესაც $p < p_0$, μ_p შორდება სავალენტო ზონის ზედა ნაპირს. ნახ. 71-ზე ნაჩვენებია n და p სიდიდეების ცვლილებისას μ_n და μ_p -ს გადახრა μ -საგან. გაშუქების მოხსნის შემდეგ τ დროის განმავლობაში n და p უტოლდება n_0 და p_0 -ს. ამ დროს

$$\mu_n = \mu_p = \mu.$$

§ 6. დიფუზიის განტოლება

თუ კრისტალის მოცულობაში გვაქვს დენის მატარებელთა კონცენტრაციის ცვლილება (გრადიენტი), მაშინ მოცულობის რომელიმე ელემენტში ელექტრონების ცვლილება დროის ერთეულში შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g_1 - \frac{n - n_0}{\tau_n} + \frac{1}{e} \operatorname{div} j_n, \quad (7.34)$$

სადაც g_1 არის სინათლის მოქმედებით შექმნილი წყვილების რიცხვი ერთ წამში, $\frac{n - n_0}{\tau_n}$ — რეკომბინაციის შედეგად გამქრალი ელექტრონების რიცხვი წამში, $\frac{1}{e} \operatorname{div} j_n$ — დიფუზიის შედეგად მიღებული ელექტრონების რიცხვის ცვლილება.

$$j_n = e (E n u_n + D_n \operatorname{grad} n) \quad (7.35)$$

j_n არის სრული ელექტრონული დენი, რომელიც შედგება დიფუზიური და ომური დენების ჯამისაგან. სრულიად ანალოგიურად დაიწერება ხვრელების ცვლილების კანონი

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g_1 - \frac{p-p_0}{\tau_p} - \frac{1}{e} \operatorname{div} j_p, \quad (7.36)$$

სადაც

$$j_p = e(E p u_p - D_p \operatorname{grad} p).$$

(7.34) და (7.36) განტოლებებს უწოდებენ დიფუზიურ ანდა უწყვეტობის განტოლებებს.

სტაციონარულ მდგომარეობაში

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = 0.$$

ეს გვაძლევს:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{e} \operatorname{div} j_n &= g_1 - \frac{n-n_0}{\tau_n}, \\ \frac{1}{e} \operatorname{div} j_p &= g_1 - \frac{p-p_0}{\tau_p}. \end{aligned} \quad (7.37)$$

(7.37) განტოლებები გამოსახავენ ელექტრონების (ხვრელების) რიცხვთა შენახვის კანონს. სტაციონარულ მდგომარეობაში მოცულობის ალბულო ელემენტიდან გამოსული ელექტრონების (ხვრელების) რიცხვი უდრის სინათლის მოქმედებით (ან სხვა ფაქტორებით) გაჩენილ ელექტრონების (ხვრელების) რიცხვს მინუს ალბულო მოცულობის შიგნით რეკომბინაციის შედეგად გამქრალი ელექტრონების (ხვრელების) რიცხვი.

თ ა ვ ი VIII

გ ა დ ა ტ ა ნ ი ს მ ო მ ლ ე ნ ე ბ ი

§ 1. ბ ო ლ ც მ ა ნ ი ს ბ ა ნ ტ ო ლ ე ბ ა

ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია სამართლიანია ისეთი სისტემა-სათვის (მაგალითად, მეტალში ელექტრონული გაზისათვის), რომელიც იმყოფება სტატისტიკური წონასწორობის მდგომარეობაში. მაგრამ, როდესაც ელექტრონული გაზი იმყოფება გარეგანი ელექტრული და მაგნიტური ველების მოქმედების ქვეშ, სტატისტიკური წონასწორობის მდგომარეობა ირღვევა. ელექტრონები (ხვრელები) გარეგან ველში იძენენ აჩქარებას ანდა ენერგიას, რომელსაც საშუალო თავისუფალი განაზღვრის მანძილზე მესერის რხევებთან (ფონონებთან) ანდა მინარევ ატომებთან დაჯახების შედეგად მთლიანად ან ნაწილობრივ კარგავენ. ასეთი დაჯახებების (ურთიერთქმედების) შედეგად მოცემული სისტემა (ელექტრონული გაზი) გადადის ახალი წონასწორობის მდგომარეობაში, რომელსაც დინამიკურ წონასწორობას უწოდებენ. აპრიგად, გარეგან ველს მოცემული სისტემა გამოჰყავს სტატისტიკური წონასწორობის მდგომარეობიდან, ხოლო დაჯახებებს ანდა ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედებას ეს სისტემა გადაჰყავს ახალ წონასწორობის მდგომარეობაში, ამიტომ დინამიკური წონასწორობის შესაბამისი განაწილების ფუნქცია უნდა იქნეს მონახული შემდეგი პირობიდან

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ვალთ}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{დაჯ.}} = 0. \quad (8.1)$$

ქვემოთ ნაჩვენები იქნება, რომ ამ განტოლების ამოხსნა მცირე გარეგანი ველების შემთხვევაში შეიძლება წარმოდგენილი იქნეს—შეუფოთოებელი ფერმი-დირაკის ფუნქციას პლუს მცირე დამატება. სწორედ ეს უკანასკნელი საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ ელექტრო და სითბოგამტარებლობის კოეფიციენტები, ხოლის, პელტრეს, ტომსონისა და სხვა ეფექტები. იმ ეფექტებს, რომლებიც დაკავშირებულია გარეგანი ველის მოქმედ-

ბით ნაწილაკების წანაცვლებასთან, გადატანის მოვლენებს ანდა კინეტიკის პროცესებს უწოდებენ.

განვიხილოთ ფაზური სივრცის ელემენტი $dx dy dz dp_x dp_y dp_z$, ამ ელემენტში მოხვედრილი ნაწილაკთა რიცხვი უდრის

$$dn = 2f(E) \frac{dx dy dz dp_x dp_y dp_z}{h^3} = \frac{2m^3}{h^3} f(E) dx dy dz dv_x dv_y dv_z = f_n dx dy dz dv_x dv_y dv_z, \quad (8.2)$$

სადაც

$$f_n = \frac{2m^3}{h^3} \cdot f(E). \quad (8.3)$$

ნაწილაკთა ეს რიცხვი (ანდა f_n) როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, შეიძლება შეიცვალოს ორი ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელი მიზეზების შედეგად:

1. გარეგან ველში ელექტრონები იძენენ აჩქარებას, რის შედეგად ისინი გადადიან ფაზური სივრცის ერთი უჯრედიდან მეორეში. f_n -ის სათანადო ცვლილება მიმდინარეობს უწყვეტი გზით და აღვნიშნოთ

$$\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{ველ}} - \text{ით.}$$

2. f_n ფუნქციის ცვლილება შეიძლება მოხდეს ნახტომისებურად, შედეგად იმისა, რომ ელექტრონების სიჩქარე იცვლება ნახტომისებურად, ყოველი დაჯახებისას. ეს ცვლილება აღვნიშნოთ $\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{დაჯ.}}$ -ით.

გამოეთვალათ ცალ-ცალკე $\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{ველი}}$ და $\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{დაჯ.}}$. ვინაი-

დან f_n ფუნქციაა $xy z v_x v_y v_z$ და v_z კოორდინატებისა, ამიტომ ამ ფუნქციის უწყვეტი ცვლილება ერთ წამში ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{ველი}} &= \frac{\partial f_n}{\partial x} \cdot v_x + \frac{\partial f_n}{\partial y} v_y + \frac{\partial f_n}{\partial z} v_z + \\ &+ \frac{\partial f_n}{\partial v_x} a_x + \frac{\partial f_n}{\partial v_y} a_y + \frac{\partial f_n}{\partial v_z} a_z, \end{aligned}$$

სადაც a_x , a_y და a_z არის ელექტრონის აჩქარების კომპონენტები მიღებული გარეგან ველში. იგივე შედეგი შეიძლება მივიღოთ აგრეთვე სხვანაირად: განვიხილოთ ფაზური მოცულობის ორი ელემენტი კოორდინატებით:

$$x \ y \ z \ v_x \ v_y \ v_z$$

და

$$\begin{aligned} x &- v_x dt, \ y - v_y dt, \ z - v_z dt. \\ v_x &- a_x dt, \ v_y - a_y dt, \ v_z - a_z dt \end{aligned}$$

აღნიშნულ ელემენტებში მოხვედრილ ნაწილაკთა რიცხვი იქნება, სა-
თანადოდ

$$f_n(xy z v_x v_y v_z) dx dy dz dv_x dv_y dv_z$$

და

$$f_n(x - v_x dt \dots v_x - a_x dt, \dots) dx dy dz dv_x dv_y dv_z.$$

გადატანის (ველის მოქმედების) შედეგად dt დროში $xy z v_x v_y v_z$ კოორ-
დინატების ფაზურ უჯრედში მოთავსებული ნაწილაკები გავლენ ამ უჯრე-
დიდან და ამავე უჯრედში შემოვლენ ის ნაწილაკები, რომლებიც
მდებარეობენ მეორე უჯრედში და რომლის კოორდინატებია $x - v_x dt$,
 $v_x - a_x dt \dots$ და ა. შ. მაშასადამე, აღნიშნულ ფაზურ უჯრედში ნაწილაკ-
თა რიცხვის ცვლილება გადატანის შედეგად იქნება

$$(\Delta f_n)_{\text{ვალ}} = f_n(x - v_x dt, \dots v_x - a_x dt, \dots) - f_n(xy z v_x v_y v_z) =$$

$$= - \left(\frac{\partial f_n}{\partial x} v_x + \frac{\partial f_n}{\partial y} v_y + \frac{\partial f_n}{\partial z} v_z + \frac{\partial f_n}{\partial v_x} a_x + \frac{\partial f_n}{\partial v_y} a_y + \frac{\partial f_n}{\partial v_z} a_z \right).$$

ეს უკანასკნელი ემთხვევა (A) ფორმულას.

გამოვთვალოთ $\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{ლაჯ.}}$. ეს უკანასკნელი შეიძლება წარმოვიდ-
გინოთ შემდეგი სახით:

$$\left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{ლაჯ.}} = B - A, \quad (8.4)$$

სადაც A წარმოადგენს ნაწილაკების იმ რიცხვს, რომლებიც დაჯახებების
შედეგად მოცემული ფაზური უჯრედიდან (რომლის კოორდინატებია
 $xy z v_x v_y v_z$) გავლენ სხვა ფაზურ უჯრედებში ერთი წამის განმავლობაში. ანა-
ლოგიურად, B წარმოადგენს იმ ნაწილაკთა რიცხვს, რომლებიც სხვა ფაზურ
უჯრედებში მომხდარი დაჯახებების შედეგად შემოვლენ მოცემულ ფაზურ
უჯრედში ერთი წამის განმავლობაში. A და B სიდიდეებს შეიძლება მიე-
ცეთ ისეთი სახე, რომელიც უფრო ხელსაყრელი იქნება ელექტრო და
სითბოგამტარებლობის და აგრეთვე სხვა ეფექტების გამოსათვლელად.

ვთქვათ, $W(v_x v_y v_z v'_x v'_y v'_z)$ არის ალბათობა იმისა, რომ დაჯახებების
შედეგად ერთ წამში ელექტრონის სიჩქარე აღმოჩნდება $v'_x, v'_x + dv'_x$;
 $v'_y, v'_y + dv'_y$ და $v'_z, v'_z + dv'_z$ ინტერვალში, თუ მისი სიჩქარე დაჯახე-
ბდე იყო v_x, v_y და v_z . მაშინ ასეთი ნაწილაკების საერთო რიცხვი (ე. ი.
მოცემული ფაზური უჯრედიდან სხვა უჯრედებში გადასული) იქნება

$$A = f_n(xy z v_x v_y v_z) \int W(v_x \dots v_x \dots) dv'_x dv'_y dv'_z, \quad (8.5)$$

ანალოგიურად, იმ ნაწილაკთა რიცხვი, რომლებიც აღებულ უჯრედში

შემოვლენ სხვა ფაზურ უჯრედებში მომხდარი დაჯახებების შედეგად, იქნება

$$B = \int f_n(v_x \dots v'_x \dots) W(v_x \dots v'_x \dots) dv'_x dv'_y dv'_z. \quad (8.6)$$

მაშასადამე, დინამიკური წონასწორობის პირობა (8.1) საბოლოოდ მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\frac{\partial f_n}{\partial x} v_x + \frac{\partial f_n}{\partial y} v_y + \frac{\partial f_n}{\partial z} v_z + \frac{\partial f_n}{\partial v_x} a_x + \frac{\partial f_n}{\partial v_y} a_y + \frac{\partial f_n}{\partial v_z} a_z = B - A,$$

ანდა მოკლედ

$$(v \nabla_r f_n) + \frac{1}{m} (E \nabla_v f_n) = B - A, \quad (8.7)$$

სადაც A და B მოცემულია (7.5) და (8.6) ფორმულებით. (8.7) განტოლებას ბოლცმანის განტოლებას უწოდებენ და წარმოადგენს კინეტიკის ძირითად განტოლებას.

თუ მეტალი ერთგვაროანია, ტემპერატურა ყველგან ერთი და იგივეა და გარეგან ველში არ იმყოფება, მაშინ

$$\frac{\partial f_n}{\partial x} = \frac{\partial f_n}{\partial y} = \frac{\partial f_n}{\partial z} = 0$$

და

$$a_x = a_y = a_z = 0.$$

ამ მნიშვნელობების ჩასმა (8.7)-ში გვაძლევს:

$$A = B.$$

ეს ტოლობა გამოხატავს დეტალური წონასწორობის პირობას.

ვთქვათ, მეტალის ნაჭერი იმყოფება ერთგვაროვან ელექტრულ და მაგნიტურ ველში. ამასთან, დავუშვათ, რომ მაგნიტური ველი H მიმართულია oz ღერძის მიმართულებით, ხოლო ელექტრული ველი E მოთავსებულია xoy სიბრტყეზე, დავწეროთ ელექტრონის მოძრაობის განტოლება

$$m \mathbf{a} = -e \mathbf{E} - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}, \quad (8.8)$$

სადაც c არის სინათლის სხივის სიჩქარე, e —ელექტრონის ელექტრული მუხტი, m —მასა, $\mathbf{a}$ —ჩქარება. გადავწეროთ (8.8) განტოლება გეგმილებში

$$m a_x = - \left(e E_x + \frac{e}{c} v_y H_z \right),$$

$$ma_y = - \left(eE_y - \frac{e}{c} v_x H_z \right),$$

$$ma_z = 0.$$

თუ ამ განტოლებებიდან განვსაზღვრავთ a_x , a_y და a_z -ს და ჩავსვათ (8.7) განტოლებაში, მივიღებთ:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_n}{\partial x} \cdot v_x + \frac{\partial f_n}{\partial y} \cdot v_y + \frac{\partial f_n}{\partial z} v_z - \frac{\partial f_n}{\partial v_x} \left(\frac{e}{m} E_x + \frac{e v_y H_z}{mc} \right) \\ - \frac{\partial f_n}{\partial v_y} \left(\frac{e E_y}{m} - \frac{e v_x H_z}{mc} \right) = B - A. \end{aligned} \quad (8.9)$$

ჩერ განვიხილოთ ამ განტოლების ის ამოხსნა, რომელიც მონახული იქნა ლორენცის მიერ. ლორენცმა განიხილა შემთხვევა, როდესაც $H=0$ და $E=E_x$. ამ შემთხვევაში (8.9) განტოლება ლებულობს შემდეგ სახეს:

$$\frac{\partial f_n}{\partial x} \cdot v_x - \frac{e E_x}{m} \frac{\partial f_n}{\partial v_x} = B - A. \quad (8.10)$$

ამ განტოლების მარჯვენა მხარეს ლორენცი ამარტივებს შემდეგი საში დაშვების საფუძველზე:

1. ელექტრონები განიცდიან დრეკად დაჯახებებს. ცხადია, ეს დაშვება არაზუსტია, მაგრამ საკმარისად კარგ მიახლოებას წარმოადგენს მეტალის თავისუფალი ელექტრონებისათვის.

2. ელექტრონების გაბნევა იზოტროპულია. ე. ი. W არ არის დამოკიდებული შეფარდებითი სიჩქარის მიმართულებაზე დაჯახებამდე და დაჯახების შემდეგ $W = W(|v|)$.

3. თუ f_n^0 -ით აღვნიშნავთ ელექტრონების განაწილების ფუნქციას გარეგანი ველის არარსებობის დროს, მაშინ გარეგანი ველის შემთხვევაში განაწილების ფუნქცია შეიძლება წარმოდგენილი იქნეს შემდეგი სახით:

$$f_n = f_n^0 + v_x \chi(v). \quad (8.11)$$

სადაც $\chi(v)$ ჭერჯერობით უცნობი ფუნქციაა სიჩქარის აბსოლუტური სიდიდისა, ამავე დროს $\chi \ll f_n^0$.

შემოვიტანოთ W -ს ნაცვლად η ფუნქცია შემდეგი სახით

$$\eta(v\mu\varphi\mu'\varphi') = \int_0^\infty W(v_x \dots v_x' \dots) v'^2 dv'. \quad (8.12)$$

სიდიდე $\eta(v\mu\varphi\mu'\varphi') \sin \mu' d\mu' d\varphi'$ გვაძლევს ალბათობას იმისა, რომ ელექტრონი, რომლის სიჩქარეა v და მიმართულება მოცემულია μ და φ კუთხეებით, დაჯახების შემდეგ აღმოჩნდება სხეულოვანი კუთხის

$\sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi'$ შიგნით, სიჩქარის აბსოლუტური სიდიდის შეუცვლელად. η -ს ანდა W -ს იზოტროპიულობის გამო (დაშვება 2) გვექნება:

$$\begin{aligned} A &= f_n(xyz v_x v_y v_z) \int W(v_x \dots v_x' \dots) dv_x' dv_y' dv_z' = \\ &= f_n \cdot \int \dots \int \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' \int W(v_x \dots v_x' \dots) v'^2 dv' = \\ &= f_n \cdot \eta \int \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = 4\pi \eta f_n. \end{aligned}$$

ანდა

$$A = 4\pi \eta (f_n^0 + v_x \chi(v)) \quad (8.13)$$

თუ (8.6)-ში შევიტანთ (8.11)-ს, გვექნება:

$$B = 4\pi \eta f_n^0 + v_x \cdot \chi(v) \eta \int \frac{v_x'}{v_x} \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi',$$

მაგრამ $\frac{v_x'}{v_x} = \cos \vartheta'$ ამიტომ $\int \cos \vartheta' \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = 0$,

ამრიგად $B = 4\pi \eta f_n^0$ და $B - A = -4\pi \eta v_x \chi(v)$. (8.14)

სიდიდე $4\pi \eta$ წარმოადგენს დაჯახებათა სრულ რიცხვს წამში, ხოლო $4\pi \eta v$ — დაჯახებათა სრულ რიცხვს ერთ სმ მანძილზე, ე. ი. საშუალო თავისუფალი განარბენის შებრუნებულ სიდიდეს

$$\frac{v}{4\pi \eta} = l. \quad (8.15)$$

თუ A და B მნიშვნელობებს შევიტანთ (8.10) განტოლებაში და უგულებელვყოფთ მაღალი რიგის მცირე წევრებს, მივიღებთ:

$$v_x \frac{\partial f_n^0}{\partial x} - \frac{e}{m} E_x \frac{\partial f_n^0}{\partial v_x} = - \frac{v}{l} v_x \chi(v). \quad (8.16)$$

რადგანაც

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2),$$

ამიტომ

$$\frac{\partial}{\partial v_x} = m v_x \frac{\partial}{\partial E}.$$

ამ დამოკიდებულების გათვალისწინებით (8.16) საბოლოოდ მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\frac{\partial f_n^0}{\partial x} - e E_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E} = - \frac{v}{l} \chi(v).$$

$$\chi(v) = -\frac{l}{v} \left(\frac{\partial f_n^0}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E} \right). \quad (8.17)$$

მაშასადამე, ზემოთ აღნიშნულ მიახლოებაში საძიებელი ფუნქცია $\chi(v)$ გამოითვლება უშუალოდ შეუშფოთებელი f_n^0 ფუნქციის საშუალებით. სანამ გადავიდოდეთ მიღებული ამოხსნის (8.17) საშუალებით მეტალის ელექტრო და სითბოგამტარებლობის კოეფიციენტების გამოთვლაზე, განვიხილოთ ბოლცმანის განტოლების უფრო ზოგადი ამოხსნა, რომელიც მიღებულ იქნა განსის მიერ. განსი ეძებს ბოლცმანის განტოლების ამოხსნას იმ შემთხვევაში, როდესაც მეტალი იმყოფება ელექტრულ და მაგნიტურ ველში (H მიმართულია x ღერძის გასწვრივ, ხოლო E მოთავსებულია xy სიბრტყეზე). ამოხსნის მეთოდი და დაშვებები იგივეა, რაც ლორენცის ამოხსნაში. განაწილების ფუნქციას ვეძებთ შემდეგი სახით:

$$f_n = f_n^0 + v_x \chi_1(v) + v_y \chi_2(v). \quad (8.18)$$

(8.14)-ის ნაცვლად ვღებულობთ

$$B - A = -\frac{v}{l} (v_x \chi_1 + v_y \chi_2). \quad (8.19)$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ $\chi_1, \chi_2 \ll f_n^0$ და

$$\frac{\partial}{\partial v_x} = m v_x \frac{\partial}{\partial E} \quad \frac{\partial}{\partial v_y} = m v_y \frac{\partial}{\partial E},$$

მაშინ ბოლცმანის განტოლება გვაძლევს χ_1 და χ_2 -ს მიახლოებითი მნიშვნელობებისათვის შემდეგ ორ განტოლებას

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_n^0}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E} &= -\frac{v}{l} \chi_1 - \frac{e}{mc} H \chi_2, \\ \frac{\partial f_n^0}{\partial y} - eE_y \frac{\partial f_n^0}{\partial E} &= \frac{e}{mc} H \chi_1 - \frac{v}{e} \chi_2. \end{aligned} \quad (8.20)$$

ამ განტოლებათა ამოხსნა χ_1 და χ_2 -თვის გვაძლევს:

$$\begin{aligned} \chi_1 &= -\frac{l}{v} \frac{f_1 - s f_2}{1 + s^2}, \\ \chi_2 &= -\frac{l}{v} \frac{f_2 + s f_1}{1 + s^2}, \end{aligned} \quad (8.21)$$

$$f_1 = \frac{\partial f_n^0}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E},$$

$$f_2 = \frac{\partial f_n^0}{\partial y} - eE_y \frac{\partial f_n^0}{\partial E},$$

$$s = \frac{elH}{mcv}.$$
(8.22)

§ 2. მეტალის ელემტრო და სითბოგამტარების კოეფიციენტების გამოთვლა

თუ მეტალში გარკვეული მიმართულებით შექმნილია ელექტრული ველი, მაშინ მივიღებთ მანამდე ქაოსურად მოძრავი ელექტრონების გარკვეულ მოწესრიგებულ მოძრაობას ველის საწინააღმდეგო მიმართულებით, რასაც შეესაბამება გარკვეული სიდიდის დენის ძალა. თუ ამავე დროს მეტალში შევქმნით ტემპერატურის გრადიენტს, მივიღებთ სითბოს გარკვეული რაოდენობის ნაკადს. სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ ელექტრული ველი და ტემპერატურის გრადიენტი ემთხვევა ox ღერძის მიმართულებას. ამ შემთხვევაში დენის ძალა და სითბოს ნაკადი შემდეგი ფორმულით გამოისახება

$$I_x = -e \int v_x f_n dv_x dv_y dv_z \quad (8.23)$$

($dx dy dz = 1 \text{ სმ}^3$)

და

$$Q_x = \int v_x \cdot \frac{mv^2}{2} \cdot f_n dv_x dv_y dv_z. \quad (8.24)$$

თუ ამ ფორმულებში ჩავსვათ

$$f_n = f_n^0 + v_x \chi(v),$$

მივიღებთ:

$$I_x = - \int_{-\infty}^{\infty} e v_x f_n^0 dv_x dv_y dv_z - \int_{-\infty}^{\infty} e v_x^2 \chi(v) dv_x dv_y dv_z \quad (a)$$

$$Q_x = \int_{-\infty}^{\infty} v_x \cdot \frac{mv^2}{2} \cdot f_n^0 dv_x dv_y dv_z + \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 \cdot \frac{mv^2}{2} \chi(v) dv_x dv_y dv_z \quad (b)$$

აქ ინტეგრირება წარმოებს v_x , v_y და v_z -ის ყველა მნიშვნელობით — $-\infty$ -დან $+\infty$ -მდე. მაგრამ f_n^0 ლუწი ფუნქციაა v -სი, ამიტომ (ა) და (ბ) ფორმულების პირველი წევრები იგივერად ნულის ტოლია, რადგანაც ინტეგრალქვეშ სიდიდე კენტი ფუნქციაა v_x -ის. ამრიგად

$$I_x = -e \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 \chi(v) dv_x dv_y dv_z \quad (8.25)$$

$$Q_x = \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2 \cdot \frac{mv^2}{2} \cdot \chi(v) dv_x dv_y dv_z \quad (8.26)$$

თუ ამ ფორმულებში შევიტანთ $\chi(v)$ -ს მნიშვნელობას (8.17)-დან და შემოვიტანთ v , μ , φ სფერულ კოორდინატებს, მაშინ μ და φ კუთხეებით ინტეგრირების შედეგად მიიღება:

$$I_x = \frac{4\pi e}{3} \int_0^{\infty} v^3 l \left(\frac{\partial f_n^0}{\partial x} - e E_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E} \right) dv, \quad (8.27)$$

$$Q_x = -\frac{4\pi n}{3} \int_0^{\infty} v^3 l \left(\frac{\partial f_n^0}{\partial x} - e E_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E} \right) dv. \quad (8.28)$$

განვიხილოთ ცალ-ცალკე ელექტრო და სითბოგამტარებლობის შემთხვევები:

ა) ელექტროგამტარებლობა. ვთქვათ მეტალში ტემპერატურის გრადიენტი არა გვაქვს, მაშინ f_n^0 კოორდინატზე დამოკიდებული აღარ იქნება, ამიტომ $\frac{\partial f_n^0}{\partial x} = 0$. ამ შემთხვევაში (8.27) ფორმულა მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$I_x = -\frac{4\pi}{3} e^2 E_x \int_0^{\infty} v^3 l \frac{\partial f_n^0}{\partial E} dv,$$

მაგრამ

$$f_n^0 = \frac{2m^3}{h^3} f(E).$$

სადაც $f(E)$ ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქციაა. თუ სიჩქარიდან გადავალთ ენერგიაზე ($E = \frac{mv^2}{2}$), მივიღებთ:

$$I_x = -E_x \cdot \frac{e^2}{3} \frac{C}{V} \sqrt{\frac{2}{m}} \int_0^{\infty} E l \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE, \quad (8.29)$$

სადაც

$$\frac{C}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m)^{3/2} = \frac{3}{2} \frac{n_0}{\mu_0^{3/2}}. \quad (8.30)$$

თუ გამოვიყენებთ (8.22) ფორმულას, ნულოვან მიახლოებაში გვექნება

$$\int_0^{\infty} E l \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE = -\mu_0 l(\mu_0).$$

ამრიგად

$$I_x = E_x \cdot \frac{e^2}{3} \cdot \frac{c}{V} \cdot \sqrt{\frac{2}{m} \mu_0 l(\mu_0)} = E_x \frac{e^2 n_0 l(\mu_0)}{m v(\mu_0)}.$$

ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტისათვის ვღებულობთ

$$\sigma = \frac{I_x}{E_x} = \frac{e^2 n_0 l(\mu_0)}{m v(\mu_0)}, \quad (8.31)$$

სადაც $l(\mu_0)$ და $v(\mu_0)$ არის საშუალო თავისუფალი განარბენი და სიჩქარე, რომელიც ეთანადება ფერმის საზღვრის ელექტრონებს. ამ ფორმულაში ყველა სიდიდე ცნობილია, გარდა l -ისა, რომლის გამოთვლა თავისუფალი ელექტრონების მოდელზე დაყრდნობით შეუძლებელია.

ბ) სითბოგამტარებლობა. ვთქვათ ox ღერძის მიმართულებით გვაქვს ტემპერატურის გრადიენტი $\left(\frac{dT}{dx} \neq 0\right)$. წმინდა სითბოგამტარებლობის გამოსათვლელად ვისარგებლებთ იმ პირობით, რომ სრული დენი ნულის ტოლია $I_x = 0$. ამ შემთხვევაში ვისარგებლებთ იმავე (8.27) და (8.28) ფორმულებით, სადაც $\frac{\partial f_n^0}{\partial x}$ -ის ნაცვლად უნდა ჩავსვათ

$$\frac{df_n^0}{dx} = \frac{df_n^0}{dT} \cdot \frac{dT}{dx} = -\frac{\partial f_n^0}{\partial E} \cdot \left(\frac{E}{T} + T \frac{d}{dT} \left(\frac{\mu}{T}\right)\right) \frac{dT}{dx}. \quad (8.32)$$

ეს გვაძლევს

$$I_x = -\frac{e}{3} \sqrt{\frac{2}{m}} \left\{ K_1 \left[e E_x + T \frac{d}{dT} \left(\frac{\mu}{T}\right) \cdot \frac{dT}{dx} \right] + \frac{K_2}{T} \frac{dT}{dx} \right\} \quad (8.33)$$

$$Q_x = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{m}} \left\{ K_2 \left[e E_x + T \frac{d}{dT} \left(\frac{\mu}{T}\right) \frac{dT}{dx} \right] + \frac{K_3}{T} \frac{dT}{dx} \right\}, \quad (8.34)$$

სადაც

$$K_i = \frac{C}{V} \int_0^{\infty} E^i l \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE. \quad (8.35)$$

$$(i=1, 2, 3)$$

(8.23) და (8.24) ფორმულებიდან E_x შეიძლება ამოვადლოთ, $I_x = 0$ პირობის გამოყენებით

$$I_x = -\frac{e}{3} \sqrt{\frac{2}{m}} \left\{ K_1 \left[eE_x + T \frac{d}{dT} \left(\frac{\mu}{T} \right) \cdot \frac{dT}{dx} \right] + \frac{K_2}{T} \frac{dT}{dx} \right\} = 0.$$

აქედან

$$eE_x + T \frac{d}{dT} \left(\frac{\mu}{T} \right) \cdot \frac{dT}{dx} = -\frac{K_2}{k_1 T} \frac{dT}{dx}.$$

ამ მნიშვნელობის შეტანა (8.34)-ში გვაძლევს

$$Q_x = -\frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{m}} \frac{K_1 K_3 - K_2^2}{K_1 T} \cdot \frac{dT}{dx}.$$

აქედან სითბოგამტარებლობის კოეფიციენტისათვის მიიღება შემდეგი გამოსახულება

$$\alpha = \frac{Q_x}{\frac{dT}{dx}} = -\frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{m}} \cdot \frac{K_1 K_3 - K_2^2}{K_1 T}. \quad (8.36)$$

(8.35) ინტეგრალები გამოითვლებიან (8.22) ფორმულით, ეს გვაძლევს

$$k_1 = -\frac{C}{V} \left(\mu_0' l(\mu_0) + \frac{\pi^2}{6} k^2 T^2 \frac{d^2}{dE^2} (lE) \right) \Big|_{E=\mu_0}, \quad (8.37)$$

ამ ფორმულის პირველი მიახლოების ჩასმა (7.36)-ში არ იძლევა არავითარ ეფექტს ($K_1 K_3 - K_2^2 = 0$), ხოლო მეორე მიახლოების ჩასმა გვაძლევს

$$\chi = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{k^2 n_0 l(\mu_0)}{m v(\mu_0)} \cdot T. \quad (8.38)$$

ამრიგად (8.31) და (8.38) ფორმულების შეფარდებაში უცნობი პარამეტრი l იკვეცება და მიიღება ვიდემან-ფრანცის კანონი

$$\frac{\chi}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 T. \quad (8.39)$$

მაშასადამე, თავისუფალი ელექტრონების ჰიპოტეზა საშუალებას იძლევა თეორიულად მივიღოთ ვიდემან-ფრანცის კანონი, რომელიც ცდით იქნა დადგენილი. ეს კანონი საგრძნობ გადახვევას იძლევა დაბალ ტემპერატურაზე ექსპერიმენტული მნიშვნელობისაგან.

§ 3. ელემენტარონებისა და ხვრელმების ძვრადობა

თავისუფალი განარბენის დროთა განაწილების კანონი

იდეალური მესერის პერიოდულ ველში ელექტრონული¹ ტალღები ვრცელდებიან გაბნევის გარეშე, ამიტომ სხეულის ელექტრული წინააღმდეგობა ნულის ტოლია. მაგრამ რეალურ კრისტალებში მესერის პე-

¹ შემდეგში ყოველთვის, სადაც ელექტრონზეა ლაპარაკი, იგივე ითქმის აგრეთვე ხვრელზედაც.

რიოდული ველი დამახინჯებულია მრავალი მიზეზის გამო, მაგალითად: სითბური რხევების შედეგად, მიკროსკოპული და მაკროსკოპული დეფექტების არსებობით და სხვა. მესერის პერიოდული ველის დამახინჯებებზე ზღედა ელექტრონული ტალღების გაბნევა. რაც მეტია გაბნევა, მით მეტია სხეულის ელექტრონული წინააღმდეგობა. კრისტალებში ელექტრონული ტალღების გაბნევის საკითხი დაკავშირებულია როგორც ფიზიკურ ისე მათემატიკურ სიზნელებთან, ამიტომ ამოცანის გამარტივების მიზნით აქვთებენ ორ დაშვებას:

1. ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონი ნებისმიერ მცირე დროის ინტერვალში dt გააქეთებს გადასვლას ერთი კვანტური მდგომარეობიდან მეორეში, ტოლია $\frac{dt}{\tau}$ -ს, ამასთან გადასვლის ეს ალბათობა დამოკიდებული

არ არის იმაზე, თუ რამდენხანს იმყოფებოდა ელექტრონი გადასვლამდე რომელიმე კვანტურ მდგომარეობაში. τ რაღაც პარამეტრია, რომელსაც დროის განზომილება აქვს. კორპუსკულური ენით რომ ვთქვათ, ეს დაშვება ნიშნავს შემდეგს: ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონმა მიიღოს დაჯახება dt დროის ინტერვალში, უდრის $\frac{dt}{\tau}$ -ს. ამასთან, დაჯახების ალ-

ბათობა დამოკიდებული არ არის იმაზე, თუ რამდენი დრო გავიდა წინა დაჯახებიდან მოცემულ დაჯახებამდე.

2. დამოუკიდებლად იმისა, თუ როგორი იყო $t=0$ მომენტში ელექტრონების განაწილება კვანტური მდგომარეობის მიხედვით, გადასვლის შემდეგ მათი განაწილება კვანტური მდგომარეობის მიხედვით ისევ უნდა ემორჩილებოდეს სითბურ წონასწორობას. კორპუსკულური ენით რომ ვთქვათ, ეს დაშვება ნიშნავს შემდეგს: დაჯახების დროს ელექტრონი მთლიანად კარგავს ენერგიის იმ რაოდენობას, რომელიც მან მიიღო ელექტრულ ველში დაჯახებიდან დაჯახებამდე, და ამრიგად, იგი გადადის საწყის წონასწორობის მდგომარეობაში. ეს მეორე დაშვება უფრო უხეშია, ვიდრე პირველი, ვინაიდან სინამდვილეში დაჯახების დროს ელექტრონი კარგავს მხოლოდ ელექტრულ ველში შეძენილი ენერგიის ნაწილს, რომლის ზუსტი განსაზღვრა შეუძლებელია რაიმე ფიზიკურ მოსაზრებაზე დაყრდნობით.

ზემოთ მოყვანილ დაშვებათა საფუძველზე განვიხილოთ, თუ როგორ არის განაწილებული თავისუფალი განარბენის შესაბამისი დროის ინტერვალები. ვთქვათ, ძალიან დიდი T დროის განმავლობაში ელექტრონი განიცდის n მიმდევრობით დაჯახებებს. ამ დაჯახებებს შორის გასული დროის ინტერვალები აღენიშნოთ $t_1, t_2, \dots, t_n$ ით. ჩვენ გვაინტერესებს დროის ამ ინტერვალების განაწილების კანონი, სხვანაირად რომ ვთქვათ, გვაინტერესებს როგორია ალბათობა იმისა, რომ ორ მომდევნო დაჯახებათა შორის გასულია t დრო. ამ საკითხის დასადგენად ვიქცევით შემდეგნაირად:

ერთი და იმავე ელექტრონის მიმდევრობითი დაჯახებების ნაცვლად ვიხილათ ერთდროულად n ელექტრონს, რომლებმაც პირველი დაჯახება მიიღეს $t=0$ მომენტში და შემდეგ ვეძებთ ალბათობას იმისა, რომ პირველმა ელექტრონმა შემდგომი დაჯახება მიიღო t_1 მომენტში, მეორე ელექტრონმა t_2 მომენტში და ა. შ. ეს მეთოდი კარგად ცნობილი მეთოდია სტატისტიკურ ფიზიკაში, რომელიც წარმოადგენს ქრონოლოგიური საშუალოს (საშუალო დროის მიხედვით) შეცვლას სტატისტიკური საშუალოთი (ერთობლიობის მიხედვით საშუალოთი).

პირველი დაშვების თანახმად, ალბათობა იმისა, რომ ელექტრონმა განიცადოს დაჯახება dt დროში, უდრის $\frac{dt}{\tau}$ -ს, ამიტომ $n \frac{dt}{\tau}$ იქნება ელექტრონთა რიცხვი, რომლებმაც განიცადეს დაჯახება dt დროის ინტერვალში. ცხადია, ამ სიდიდით შემცირდება ელექტრონთა რიცხვი, რომლებსაც არ განუცდიათ დაჯახება $t=0$ -დან t მომენტამდე, ე. ი.

$$-dn = n \frac{dt}{\tau}.$$

აქედან

$$n(t) = n(0)e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (8.40)$$

ეს ფორმულა გვაძლევს თავისუფალ განარბენთა სათანადო დროის ინტერვალების განაწილების კანონს. კანონი კი საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ t -ს ნებისმიერი ხარისხის საშუალო მნიშვნელობა. მართლაც

$$\overline{t} = \frac{\int_0^{\infty} t n(t) dt}{\int_0^{\infty} n(t) dt} = \frac{1}{n(0)} \int_0^{\infty} n(0) \cdot t \cdot e^{-t/\tau} \cdot \frac{dt}{\tau} = \tau.$$

მაშასადამე, პარამეტრი τ წარმოადგენს ორ მომდევნო დაჯახებათა დროის საშუალო მნიშვნელობას. გამოვთვალოთ აგრეთვე t^2 , რადგანაც იგი შემდეგში დაგვჭირდება

$$\overline{t^2} = \frac{\int_0^{\infty} t^2 n(t) dt}{\int_0^{\infty} n(t) dt} = \frac{1}{n(0)} \int_0^{\infty} n(0) t^2 e^{-\frac{t}{\tau}} \frac{dt}{\tau} = 2\tau^2.$$

ფლუქტუაციის თეორიიდან ცნობილია, რომ თუ სისტემა გარეშე მიზეზების შედეგად გამოყვანილია წონასწორობის მდგომარეობიდან მცირე

სიდიდით, მაშინ გარეშე მიზეზების მოხსნის შემდეგ უბრუნდება საწყის მდგომარეობას (დაჯახებების შედეგად). ექსპონენციალური კანონით

$$(\Delta f)_t = (\Delta f)_0 \cdot e^{t/\tau}, \quad (8.41)$$

სადაც $(\Delta f)_t$ არის სისტემის დამახასიათებელი ნებისმიერი პარამეტრის გადახრის მნიშვნელობა მისი საშუალო მნიშვნელობისაგან t მომენტში, ხოლო $(\Delta f)_0$ —საწყის მომენტში—ანდა, გარეშე მიზეზების მოხსნის მომენტში. პარამეტრს τ -ს ეწოდება რელაქსაციის დრო, რომელიც თანახმად (8.41) ფორმულისა, წარმოადგენს დროის იმ ინტერვალს, რომლის განმავლობაში $(\Delta f)_0$ სიდიდე ეცემა e -ჯერ.

ზემოთ მოყვანილი ორი დაშვების საფუძველზე (ანდა მიახლოებაში) რელაქსაციის დრო უდრის თავისუფალი განარბენის საშუალო დროს.

გ) ნაწილაკთა დრეიფის საშუალო სიჩქარე

ვთქვათ, მოცემულია n ელექტრონი. საშუალოდ τ დროის განმავლობაში ისინი მოძრაობენ სწორხაზოვნად და თანაბრად, მხოლოდ დაჯახების დროს იცვლიან მიმართულებას. როდესაც გარეგანი ველი არა გვაქვს, მათი მოძრაობა ქაოსურია. საშუალო თავისუფალი განარბენის სიდიდე უდრის

$$l = v_0 \cdot \tau,$$

სადაც v_0 არის ელექტრონის სიბუჩი მოძრაობის საშუალო სიჩქარე. დავუშვათ, რომ ელექტრონებზე მოქმედებენ გარეგანი ელექტრული E და მაგნიტური H ველები. როგორც ვიცით, მაგნიტური ველი გვაძლევს ელექტრონების ტრაექტორიის გამრუდებას, ხოლო ელექტრული ველი ($E = \text{const}$)—თანაბრად აჩქარებულ მოძრაობას

$$a = -\frac{e}{m} E.$$

ამრიგად, გარეგანი ელექტრული ველის მოქმედებით ყოველი ელექტრონი მოძრაობს სწორხაზოვნად და თანაბრად აჩქარებულად, ერთი დაჯახებიდან მეორემდე. მხოლოდ დაჯახების დროს იცვლიან მოძრაობის მიმართულებას, ამიტომ ელექტრონის სრული წანაცვლება n დაჯახების შედეგად იქნება

$$S = \frac{at_1^2}{2} + \frac{at_2^2}{2} + \dots + \frac{at_n^2}{2} = \frac{an}{2} \cdot \frac{t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_n^2}{n} = \frac{an}{2} \cdot \bar{t^2}$$

მაგრამ ვინაიდან $\bar{t^2} = 2\tau^2$, გვექნება

$$S = an\tau^2. \quad (A)$$

იგივე წანაცვლება (4) შეიძლება განვიხილოთ როგორც n ელექტრონის ღრეფი-წანაცვლება ველის გასწვრივ τ დროის განმავლობაში. ამიტომ, თუ ამ ღრეფის სიჩქარეს აღვნიშნავთ v_d -თი, მაშინ შეგვიძლია დავწეროთ

$$S = v_d \cdot \tau \cdot n = an\tau^2,$$

აქედან

$$v_d = a\tau = -\frac{e\tau}{m} E = -uE,$$

სადაც

$$u = \frac{e}{m} \tau \quad (8.42)$$

არის ელექტრონის ძვრადობის კოეფიციენტი. სრულიად ანალოგიური გამოსახულება მიიღება ხვრელების ძვრადობის კოეფიციენტისათვის. ამრიგად:

$$u_n = \frac{e}{m_n} \tau_n \quad \text{ელექტრონებისათვის} \quad (8.43)$$

$$u_p = \frac{e}{m_p} \tau_p \quad \text{ხვრელებისათვის}$$

იგივე შედეგი შეიძლება აგრეთვე მივიღოთ სხვანაირად. აღვნიშნოთ ერთ ელექტრონის კვაზი-იმპულსი p_i -თ, მაშინ n ელექტრონის სრული იმპულსი იქნება

$$P = \sum p_i.$$

საშუალო კვაზი-იმპულსი, რომელიც მოდის ერთ ელექტრონზე, იქნება

$$\bar{p} = P/n.$$

გარეგან ელექტრონულ ველს გამოჰყავს სისტემა წონასწორობის მდგომარეობიდან, სამაგიეროდ დაჯახებებს გადაჰყავს წონასწორობის მდგომარეობაში, ე. ი. გარეგანი ველით გამოწვეული სრული კვაზი-იმპულსის ცვლილება უნდა იქნეს კომპენსირებული დაჯახებებით გამოწვეული სრული კვაზი-იმპულსის ცვლილებისა

$$(dP)_{\text{ველ}} + (dP)_{\text{ჯახ.}} = 0.$$

მეორე მხრივ

$$-(dP)_{\text{ჯახ.}} = P \frac{dt}{\tau}$$

და

$$(dP)_{\text{ველ}} = -enE dt.$$

აქედან

$$\mathbf{P} = -en\tau\mathbf{E},$$

$$\bar{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{P}}{n} = -e\tau\mathbf{E},$$

ანდა

$$\bar{v} = -\frac{e\tau}{m}\mathbf{E} = -u\mathbf{E} \quad \text{სადაც} \quad u = \frac{e\tau}{m}.$$

ამრიგად, მივიღეთ იგივე შედეგი (7.42).

(8.42) ფორმულების გამოყენების დროს მხედველობაში არ იყო მიღებული ელექტრონების განაწილება ენერგიის მიხედვით—არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში—ბოლცმანის განაწილება. ამ უკანასკნელის გათვალისწინება გვაძლევს:

$$u = \frac{e}{m} \frac{\overline{v^2\tau}}{\overline{v^2}}, \quad (8.44)$$

სადაც ზედა ზაზი აღნიშნავს სტატისტიკურ გასაშუალებას. ამ ფორმულის მისაღებად გამოვიყენოთ შემდეგი ფორმულა:

$$I_x = e \int v_x^2 \cdot \frac{1}{v} \left(\frac{\partial f_n^0}{\partial x} - eE_x \frac{\partial f_n^0}{\partial E} \right) d\gamma,$$

სადაც

$$d\gamma = dv_x dv_y dv_z \quad \text{და} \quad f_n^0 = \frac{2m}{h^3} f(E).$$

$f(E)$ ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქციაა.

როდესაც კრისტალში ტემპერატურის გრადიენტი არა გვაქვს, მაშინ

$$\frac{\partial f_n^0}{\partial x} = 0,$$

გარდა ამისა, არაგადაგვარებული გაზის შემთხვევაში

$$f(E) \simeq e^{-\frac{E-E_F}{kT}},$$

თუ ამ მნიშვნელობებს შევიტანთ დენის გამოსახულებაში და ამავე დროს მხედველობაში მივიღებთ, რომ $1/v = \tau$, მაშინ

$$I_x = \frac{e^3}{3kT} E_x \int v^2 \tau(v) dn = \frac{e^3 n}{3kT} \overline{v^2 \tau} \cdot E = \sigma E,$$

სადაც

$$\sigma = \frac{e^2 n}{3kT} \overline{v^2 \tau} = u n e.$$

$$u = \frac{e}{3kT} \frac{\bar{v}^2 \tau}{m} = \frac{e}{m} \frac{\bar{v}^2 \tau}{v^2}.$$

მეტალებში ყველა პროცესში ძირითად როლს ასრულებენ ფერმის საზღვართან ახლომდებარე ელექტრონები, ისინი თითქმის მონოკრომატულია სიჩქარეების მიხედვით. ამ შემთხვევაში (8.44) ფორმულაში გასაშუალების ნიშანი შეიძლება მოვხსნათ, ამიტომ ძალაში რჩება (8.42) დამოკიდებულება. ნახევარგამტარებში მდგომარეობა არსებითად განსხვავებულია, ელექტრონები სიჩქარეების მიხედვით განაწილებულია საკმარისად დიდ ფარგლებში, ამიტომ (8.44) ფორმულაში გასაშუალება სიჩქარეების მიხედვით აუცილებელია, რისთვისაც აუცილებელია $\tau = \tau(v)$ დამოკიდებულების დადგენა ყოველ კონკრეტულ შემთხვევაში ელექტრონების გაბნევის მექანიზმის შესაბამისად. ეს უკანასკნელი განხილული იქნება შემდეგ პარაგრაფებში.

§ 4. ხოლის ეფექტი

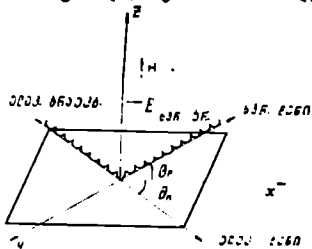
ხოლის ეფექტმა გადამწყვეტი როლი შეასრულა ნახევარგამტარებში გამტარებლობის მექანიზმის დასადგენად. n ან p ტიპის ნახევარგამტარებში გვაქვს ორი უცნობი სიდიდე: დენის მატარებელთა კონცენტრაცია და მათი ძვრადობის კოეფიციენტი. მათი განსაზღვრისათვის საჭიროა ორი ერთიმეორისაგან დამოუკიდებელი ცდა: ნიმუშის ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტისა და ხოლის მუდმივის გაზომვა.

აღნიშნული კოეფიციენტების განსაზღვრისათვის შეიძლებოდა გამოგვეყენებინა მრავალი სხვა ფიზიკური მოვლენები, მაგრამ როგორც ეს იქნება ნაჩვენები ქვემოთ, ყველა სხვა მეთოდებთან შედარებით ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტისა და ხოლის მუდმივის განსაზღვრა უფრო ეფექტურია და ამავე დროს უფრო ზუსტიც. თუ ნახევარგამტარის გამტარებლობა გამოწვეულია როგორც ელექტრონების, ისე ხვრელების მოძრაობით, მაშინ გვექნება ოთხი უცნობი სიდიდე: n , p , μ_n და μ_p , რომელთა განსაზღვრისათვის საჭიროა ოთხი ცდა. ამ შემთხვევაში ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტისა და ხოლის მუდმივის განსაზღვრა საშუალებას გვაძლევს მოვნახოთ $n\mu_n$ და $p\mu_p$ ნამრავლის მნიშვნელობები.

ხოლის მოვლენა მდგომარეობს შემდეგში: ვთქვათ, ნახევარგამტარის ნიმუშზე ox ღერძის მიმართულებით მოდებულია ელექტრული ველი E , და oy ღერძის მიმართულებით—მაგნიტური ველი H (ნახ. 72). ელექტრულ ველში ხვრელები იმოძრაებენ ველის პარალელურად, ხოლო ელექტრონები—ველის საწინააღმდეგო მიმართულებით. მაგნიტური ველის გავლენით ადგილი ექნება ელექტრონებისა და ხვრელების ტრაექტორიის გამრუდებას oxy სიბრტყეზე. ელექტრონებსა და ხვრელებზე მოქმედი ლორენცის ძალა

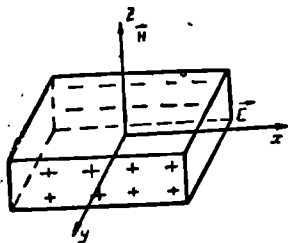
$$\mathbf{F} = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H} \quad (6.45)$$

გვაძლევს ელექტრონებისა და ხვრელების გადახრას ერთსა და იმავე მიმართულებით. მართლაც, ელექტრონებისათვის $e < 0$ და $\mathbf{v} \nparallel \mathbf{I}$, ხვრელებისათვის $e > 0$ და $\mathbf{v} \parallel \mathbf{I}$, ორივე შემთხვევაში $e\mathbf{v} > 0$. ამიტომ თანახმად (6.45) ფორმულისა, ელექტრონებსა და ხვრელებზე მოქმედ ძალას აქვს ერთი და იგივე მიმართულება. ნახ. 72-ზე ნაჩვენებია ელექტრონებისა და ხვრელების ტრაექტორიის და ამავე დროს სათანადო დენების მიმართულება. ლორენცის ძალის მოქმედებით ელექტრონის (ხვრელის) ტრაექტორიის გამრუდება იწარმოებს მანამდე, სანამ იგი დაჯახებას არ მიიღებს. ამის შემდეგ მოძრაობის სურათი მეორდება და ა. შ. მათი ტრაექტორია შედგება ტეხილი მრუდი წირებისაგან, რომელთა შემხები წირი მოძრაობის მიმართულებას გვაძლევს. როგორც ნახ. 72-დან ჩანს, ელექტრონული და ხვრელური დენები ox ღერძთან აღგენენ θ_n და θ_p კუთხეებს. მათ ხოლის კუთხეებს უწოდებენ. სიმარტივისათვის განვიხილოთ n ტიპის ნიმუში.



ნახ. 72.

ელექტრული და მაგნიტური ველების მიმართულება ნაჩვენებია ნახ. 73-ზე. განვიხილოთ ნიმუშის ორი წახნაგი, რომელიც მართობია oy ღერძისა. ვინაიდან ელექტრონზე მოქმედი ლორენცის ძალა მიმართულია oy ღერძის



ნახ. 73.

საწინააღმდეგოდ, წინა წახნაგთან გვექნება ელექტრონებით გაღარიბება, ხალო უკანა წახნაგთან — გამდიდრება. სხვანაირად რომ ვთქვათ, წინა წახნაგი დაიმუხტება დადებითად, ხალო უკანა წახნაგი — უარყოფითად. ეს გარემოება წარმოშობს ელექტრულ ველს oy ღერძის მიმართულებით. თუ ამ განივი ველის სიდიდეს აღვნიშნავთ E_H -ით, მაშინ ელექტრონებზე იმოქმედებს eE_H ძალა, რომე-

ლიც ლორენცის ძალის საწინააღმდეგოდ არის მიმართული. ელექტრონების ზემოთ აღნიშნული განაწილება შეწყდება მაშინ, როდესაც ეს ძალები ერთმანეთს გაუტოლდებიან, ე. ი.

$$eE_H = \frac{e}{c} v H,$$

ამ პირობიდან განისაზღვრება განივი ველის ის მნიშვნელობა, რომელიც დამყარდება წონასწორობის დროს. ამ ველს უწოდებენ ხოლის განივ ველს.

რადგანაც დენის სიმკვრივე $I = nev$,
ამიტომ

$$E_H = \frac{1}{c} v H = \frac{1}{nec} I H.$$

როგორც ვხედავთ, ხოლის განივი ველის სიდიდე პირდაპირპროპორციულია დენის სიმკვრივისა და მაგნიტური ველის ნამდვილობის. პროპორციულობის კოეფიციენტს

$$R = \frac{1}{nec} \quad (8.46)$$

უწოდება ხოლის მუდმივა.

(8.46) ფორმულის მიღების დროს ჩვენ ვიგულისხმეთ, რომ ყველა ელექტრონს გააჩნია ერთი და იგივე სიჩქარე. ასეთი დაშვება სამართლიანია მეტალებისათვის, რადგანაც მეტალებში ყველა პროტონში მონაწილეობენ ფერმის საზღვრის მახლობლად მდებარე ელექტრონები—ისინი თითქმის მონოქრომატული არიან. ნახევარგამტარების შემთხვევაში ელექტრონთა სიჩქარეები საკმარისად დიდ ფარგლებში არიან მოთავსებული, ამიტომ განივი ელექტრული ველის შესაბამისი ძალისა და ლორენცის ძალის გათვალისწინება ერთი სიჩქარის მნიშვნელობისათვის არ შეიძლება. ნახევარგამტარებში ელექტრონების სიჩქარეების მიხედვით განაწილების გათვალისწინება ხოლის მუდმივისათვის იძლევა შემდეგ ფორმულას

$$R = \frac{A}{nec}, \quad (8.47)$$

A კოეფიციენტის მნიშვნელობა მოცემული იქნება ქვემოთ. ხოლის მუდმივის (8.46) სახით ჩაწერისას ნაგულისხმევაა ერთეულების გაუსის სისტემა, სადაც ელექტრული სიდიდეები გაზომილია CGSE, ხოლო მაგნიტური სიდიდეები CGSM ერთეულებში, მაგრამ, თუ ვისარგებლებთ ერთეულების პრაქტიკული ანდა CGSM სისტემით, მაშინ (8.46) ფორმულაში c არ შევა.

ვინაიდან ხოლის მუდმივა შეიცავს დენის მატარებელთა ელექტრულ მუხტს, ამიტომ ცდაზე მიღებული ხოლის მუდმივის ნიშნის მიხედვით შეიძლება დავადგინოთ გამტარებლობის ტიპი.

$R > 0$ —გამტარებლობა ხერელურია,

$R < 0$ —გამტარებლობა ელექტრონულია.

ვინაიდან ნიშნის ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტი $\sigma = neu$,
ამიტომ

$$R\sigma = \frac{1}{c} u \cdot A. \quad (8.48)$$

ცდაზე იზომება R და σ სიდიდეები ერთმანეთისაგან დამოუკიდებლად, ამიტომ უკანასკნელი თანაფარდობა (8.48) საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ ძვრადობის კოეფიციენტი u . ხოლო ძვრადობის კოეფიციენტის განსაზღვრის შემდეგ $\sigma = ne u$ ფორმულის საშუალებით გავიგებთ ღენის მატარებელთა კონცენტრაციას. ასეთი გზით განსაზღვრულ ძვრადობას უწოდებენ დრეიფულ ძვრადობას

$$u = u_D = \frac{\text{დრეიფის საშუალო სიჩქარე}}{\text{ელექტრულ ველზე}}. \quad (8.49)$$

ხშირად ცდით იზომება არა ხოლის მუდმივა, არამედ ხოლის კუთხეები θ_n და θ_p . ადვილი საჩვენებელია, რომ

$$\theta_n = \frac{e\tau_n}{m_n c} H = \frac{u_n}{c} \cdot H \quad (8.50)$$

და

$$\theta_p = \frac{e\tau_p}{m_p c} H = \frac{u_p}{c} \cdot H.$$

მართლაც, მაგნიტური ველი $H = H_z$ ახდენს ელექტრონის ბრუნვას $\mathcal{E}$ ღერძის გარშემო ლარმორის სიხშირით

$$\omega = \frac{eH}{mc}. \quad (8.51)$$

მეორე მხრივ, ელექტრონის ბრუნვა $\mathcal{E}$ ღერძის გარშემო იწარმოებს მანამ, სანამ არ მიიღებს დაჯახებას. ამ დროს ელექტრონი, თანახმად მეორე დაშვებისა, გადადის საწყის მდგომარეობაში, შემდეგ იგი ისევ იწყებს ბრუნვას $\mathcal{E}$ ღერძის გარშემო მორიგ დაჯახებამდე და ა. შ. დაჯახებიდან დაჯახებამდე ელექტრონი მობრუნდება კუთხეზე,

$$\theta_n = \omega\tau_n = \frac{e\tau_n}{m_n c} H = \frac{u_n}{c} H,$$

ასევე ხვრელებისათვის

$$\theta_p = \omega\tau_p = \frac{e\tau_p}{m_p c} H = \frac{u_p}{c} \cdot H.$$

იგივე შედეგები შეიძლება მიღებული იქნეს აგრეთვე § 1-ში მოცემული ორი დაშვების საფუძველზე. მართლაც, პირველი დაშვების თანახმად, dt დროის ინტერვალში დაჯახებების გამო ღენის ძალა შემცირდება

$$(dI)_{\text{ავ.}} = -I \frac{dt}{\tau}$$

სიდიდებზე, რადგანაც დროის ამ ინტერვალში $\frac{dt}{\tau}$ -ნაწილი ელექტრონებისა უბრუნდებიან სითბური წონასწორობის მდგომარეობას. დროის იმავე ინტერვალში დენი იზრდება გარეგან ველში ელექტრონების აჩქარების გამო $(dI)_{\text{ველი}}$ სიდიდებზე. სტაციონარული მდგომარეობის ეს ორი პროცესი ერთმანეთს უნდა აკომპენსირებდეს, ე. ო.

$$(dI)_{\text{გაზ}} + (dI)_{\text{ველი}} = 0. \quad (a)$$

მოენახოთ $(dI)_{\text{ველი}}$

დენის სიმკვრივე $I = nev$

ანდა

$$\frac{dI}{dt} = ne \frac{dv}{dt} = \frac{ne}{m_n} F.$$

მეორე მხრივ, ელექტრომაგნიტურ ველში ელექტრონზე მოქმედი ძალა

$$F = eE - \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}.$$

აქედან

$$(dI)_{\text{ველი}} = \frac{ne}{m_n} F dt = \frac{ne^2}{m_n} E dt - \frac{e}{m_n c} \mathbf{I} \times \mathbf{H} dt.$$

$(dI)_{\text{გაზ}}$ და $(dI)_{\text{ველი}}$ ამ მნიშვნელობათა ჩასმა (a) ტოლობაში გვაძლევს:

$$\frac{ne^2}{m_n} E dt - \frac{e}{m_n c} \mathbf{I} \times \mathbf{H} dt - \frac{I}{\tau} dt = 0.$$

აქედან მიიღება

$$\mathbf{I} = \frac{ne^2}{m_n} \tau \mathbf{E} - \mathbf{I} \times \mathbf{H} \cdot \frac{e\tau}{m_n}.$$

დაეუშვათ, რომ ელექტრული დენი მიმართულია ox ღერძის პარალელურად. მაშინ $\mathbf{I}$ ვექტორის დაგეგმილება ox და oy ღერძებზე გვაძლევს

$$I_x = \frac{ne^2 \tau_n}{m_n} E_x$$

$$0 = \frac{ne^2 \tau_n}{m_n} E_y + \mathbf{I} \times \mathbf{H}_z \cdot \frac{e\tau_n}{m_n c}.$$

ამ ორი განტოლებიდან ვღებულობთ

$$E_x = \frac{I_x}{ne^2 \tau_n / m_n} = \frac{I_x}{\sigma} \quad \text{და} \quad E_y = -\frac{I_x}{\sigma} \cdot \frac{e\tau_n}{m_n} H_z.$$

როდესაც θ_n მცირეა, მაშინ $t_g \theta_n \simeq \theta_n$, ამიტომ

$$\frac{E_y}{E_x} = t_g \theta_n \simeq \theta_n = \frac{e \tau_n}{m_n c} H_z.$$

ანალოგიურად მიიღება ფორმულა θ_p -თვის.

ძვრადობას, რომელიც მიიღება ხოლის კუთხეების გაზომვით, უწოდებენ ხოლის ძვრადობას და აღნიშნავენ u_H -ით. ამრიგად, თანახმად (7.50) დამოკიდებულებისა,

$$u_H = c \cdot \frac{\theta}{H}.$$

ხოლის ძვრადობა საზოგადოდ არ უდრის იმ ძვრადობას, რომელიც შედის გამტარებლობის ფორმულაში (დრეიფულ ძვრადობას). თუ ნახევარგამტარში გვაქვს ელექტრონების მიკვრის ცენტრები, მაშინ დრეიფის სიჩქარე წარმოადგენს მიკროსკოპული სიჩქარის ნაწილს. ამ უკანასკნელს განვსაზღვრავთ როგორც სიჩქარეს არაჩაქერილი ნაწილაკებისა. მაგალითად, ტუტე-პალილურ კრისტალებში ცენტრების ძვრადობა ძალიან მცირეა, რადგანაც ასეთ კრისტალებში ჩაქერის ეფექტი საგრძნობლად ამცირებს დრეიფის სიჩქარეს. ამრიგად, ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტი, მიკვრის ცენტრების გავლენის გათვალისწინებით, შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი სახით

$$\sigma = e n_1 u_H = e n u_D, \text{ აქედან } n_1 = n \frac{u_D}{u_H},$$

სადაც n_1 არის არაჩაქერილ ნაწილაკთა კონცენტრაცია, n —სრული კონცენტრაცია.

ხოლის მუდმივა

$$R = \frac{1}{n_1 e c} = \frac{1}{n e c} \cdot \frac{u_H}{u_D}.$$

ამრიგად, (8.47) ფორმულაში შემავალი მუდმივა

$$A = \frac{u_H}{u_D}. \quad (8.52)$$

ნახევარგამტარებში ელექტრონების ენერგიის მიხედვით განაწილების გათვალისწინებით მივიღეთ

$$u_D = \frac{e}{m} \cdot \frac{\overline{v^2 \tau}}{v^2}.$$

სრულიად ისეთივე გზით მიიღება

$$u_H = \frac{e}{m} \cdot \frac{\overline{v^2 \tau^2}}{v^2 \tau}. \quad (8.53)$$

მაშასადამე

$$A = \frac{u_H}{u_D} = \frac{\overline{v^2 \tau^2} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^2 \tau})^2}. \quad (8.54)$$

(8.53) ფორმულის მისაღებად გამოვიყენოთ ღენის გამოსახულება

$$I_x = \frac{e^2}{3kT} E_x \int v^2 \tau(v) dn,$$

სადაც

$$dn = 2f(E)G(E)dE.$$

აქედან

$$dI_x = E_x \cdot \frac{e^2 v^2}{3kT} \tau(v) dn.$$

მაგნიტური ველი, რომელიც მიმართულია ox ღერძის გასწვრივ, აწარმოებს ელექტრონების მობრუნებას ამ ღერძის გარშემო $\omega = \frac{eH_z}{me}$ კუთხური სიჩქარით. მაგრამ რადგანაც საშუალოდ τ დროის განმავლობაში წარმოებს დაჯახება, რომლის შედეგად ელექტრონები გადადიან საწყის სითბურ მდგომარეობაში, ამიტომ ელექტრონების ნაკადი ან სათანადო ღენის მიმართულება მობრუნდება $\varphi = \omega \tau$ კუთხეზე? ამის გამო წარმოიშობა ღენის dI_y კომპონენტი:

$$dI_y = \varphi dI_x = \omega \tau \cdot \frac{E_x e^2}{3kT} \cdot v^2 \tau dn = E_x \cdot \frac{e^2 \omega}{3kT} v^2 \tau^2 dn,$$

აქედან

$$I_y = \frac{E_x e^2 \omega}{3kT} \cdot \int v^2 \tau^2 dn = E_x \cdot \frac{e^2 \omega}{3kT} \overline{v^2 \tau^2}.$$

მეორე მხრივ,

$$\frac{I_y}{I_x} = tg\theta = \omega \cdot \frac{\overline{v^2 \tau^2}}{v^2 \tau},$$

სადაც θ ხოლას კუთხეა. მაგრამ მცირე θ -ს შემთხვევაში $tg\theta \sim \theta$, მეორე მხრივ

$$\theta = \frac{u_H}{c} \cdot H_z,$$

აქედან

$$u_H = \frac{c\theta}{H_z} = \frac{e\omega}{H_z} \frac{\overline{v^2 \tau^2}}{v^2 \tau} = \frac{e}{m} \frac{\overline{v^2 \tau^2}}{v^2 \tau}. \quad \text{რ. ღვ.}$$

როგორც ვხედავთ u_H და u_D —მნიშვნელობათა მისაღებად აუცილებელია

ვიტოლდეთ $\tau = \tau(\nu)$ კონკრეტული სახე, რომელიც ნაჩვენები იქნება შემდეგ პარაგრაფებში.

ჩვენ განვიხილეთ შემთხვევა, როდესაც გამტარებლობა ერთი ტიპისა იყო, ელექტრონული ანდა ხვრელური, მაგრამ როდესაც გამტარებლობაში ერთდროულად მონაწილეობენ როგორც ელექტრონები ასევე ხვრელები, მაშინ ხოლის მუდმივა ღებულობს შედარებით უფრო რთულ სახეს, რომელსაც მოვიყვანთ გამოყვანის გარეშე

$$R = \frac{1}{ec} \cdot \frac{p u_{Dp} u_{Hp} - n u_{Dn} u_{Hn}}{(p u_{Dp} + n u_{Hn})^2}, \quad (8.55)$$

სადაც u_{Dp} და u_{Dn} არის დრეიფტული ძვრადობა ხვრელებისა და ელექტრონებისათვის, სათანადოდ, ხოლო u_{Hp} და u_{Hn} — ხოლის ძვრადობა ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის, შესაბამისად.

თანახმაღ (8.55) ფორმულისა, როდესაც $R=0$

$$p u_{Dp} u_{Hp} = n u_{Dn} u_{Hn}.$$

ამიტომ ხოლის მუდმივას ნიშნის მიხედვით შეუძლებელია დადგენა იმისა, n მეტია p -ზე, თუ პირიქით. მაგალითად $1nSb$ -ის შემთხვევაში ხვრელების ძვრადობა 80-ჯერ ნაკლებია ელექტრონების ძვრადობაზე. ამ დროს ხოლის მუდმივას ნიშნის მიხედვით ძნელია ვიმსჯელოთ გამტარებლობის ტიპზე. ჩვენ ზემოთ აღვნიშნეთ, რომ ხოლის ეფექტისა და გამტარებლობის გაზომვა ყველაზე უფრო ეფექტურ საშუალებას წარმოადგენს დენის მატარებელთა კონცენტრაციისა და მათი ძვრადობის განსაზღვრისათვის, ვიდრე მეთოდები, რომლებიც დამყარებულია სხვადასხვა გალვანომანტიურ და თერმომანტიურ ეფექტებზე, ე. ი. მოვლენებზე, რომლებიც წარმოიშობიან გამტარში, როდესაც ეს უკანასკნელი მოთავსებულია გარეგან მაგნიტურ ველში. ამ მეთოდებს შორის ყველაზე ეფექტურია ხოლის ეფექტი შემდეგი მიზეზების გამო: ხოლის მუდმივა შეიცავს რიცხვით კოეფიციენტს A -ს, რომლის მნიშვნელობა დამოკიდებულია ელექტრონული გაზის გადაგვარების ხარისხზე და გაბნევის მექანიზმზე. მიუხედავად იმისა, რომ ეს კოეფიციენტი რთული სახით არის დამოკიდებული მრავალ ფაქტორზე, მისი ცვლილების არე ძალიან მცირეა $A=1 \div 2$, სხვა მეთოდების გამოყენების დროს შემოდის აგრეთვე რიცხვითი კოეფიციენტი, რომელიც აგრეთვე რთული სახით არის დამოკიდებული მრავალ ფაქტორზე. მაგრამ იცვლება ძალიან დიდ ფარგლებში, ამიტომ ხოლის ეფექტით სარგებლობისას შესაძლო შეცდომა K -ის განსაზღვრისას მინიმალურია. გარდა ამისა, ხოლის ეფექტის უპირატესობა სხვა ეფექტებთან შედარებით მდგომარეობს აგრეთვე იმაშიც, რომ იგი ნაკლებად მგრძნობიარეა კრისტალის ანიზოტროპიის მიმართ.

ხოლის ეფექტი გალვანომანტიურ ეფექტს ეკუთვნის. ხშირად მას განივ ეფექტს უწოდებენ, ვინაიდან მოდებული გარეგანი მაგნიტური ველი

წარმოშობს ამ უკანასკნელის მიმართ მართობ-განივი ხოლის ველს. ხოლის განივი ველის სიდიდე ჩვენ მივიღეთ ლორენცის ძალისა და ელექტრონზე მოქმედი განივი ველის შესაბამისი ძალების გატოლებით სიჩქარის ერთი გარკვეული მნიშვნელობისათვის

$$\frac{ev_x H}{c} = eE_H.$$

ამიტომ ის ელექტრონები, რომელთა სიჩქარე $v_x > \bar{v}_x$ გადაიხრებიან ერთ მხარეს და გადასცემენ თავიანთ ჰარბ ენერგიას (საშუალო სითბურ ენერგიასთან შედარებით) მესერს, რის შედეგად ეს წახნაგი გათბება. ხოლო ის ელექტრონები, რომელთა სიჩქარე $v_x < \bar{v}_x$, გადაიხრებიან საწინააღმდეგო მიმართულებით და, რადგანაც მათ გააჩნიათ საშუალო სითბურ ენერგიაზე ნაკლები ენერგია, შეიძენენ ენერგიას მესერისაგან, რის გამოც ეს წახნაგი გაცივდება. გამთბარი წახნაგიდან ცივისაკენ გვექნება სითბოს ნაკადი და ერთ გარკვეულ ტემპერატურათა სხვაობაზე დამყარდება სტაციონარული მდგომარეობა. ამ ეფექტს ეტინგაუზერის ეფექტს უწოდებენ, იგი წარმოადგენს განივ თერმომაგნიტურ ეფექტს. ეს ეფექტი ძალიან მცირეა, ამიტომ მისი გაზომვა ცდაზე ძალზე ძნელია.

§ 5. რელატივისტური ლაზერი

ბოლცმანის განტოლება (8.5) შეიძლება აგრეთვე ჩაიწეროს შემდეგი სახით:

$$(\nabla_r f_n) + \frac{1}{m} (F \nabla_v f_n) = \int \{f_n(v'r)W(v'v) - f_n(vr)W(vv')\} dv'$$

სადაც

$$dv' = dv'_x dv'_y dv'_z.$$

ეს უკანასკნელი არის ინტეგრირებული განტოლება, რომლის ამოხსნისათვის უნდა ვიცოდეთ გადასვლის ალბათობის $W(vv')$ -ს კონკრეტული სახე. ადვილი საჩვენებელია, რომ გადასვლის ალბათობები $v' \neq v$ ერთმანეთის ტოლია, ე. ი. $W(vv') = W(v'v)$. ამის დასამტკიცებლად განვიხილოთ წონასწორობის მდგომარეობა. თუ გაზი გადაგვარებული არ არის, მაშინ¹

$$f = f_0(E) = e^{\frac{\mu - E}{k_B T}},$$

სადაც E არის სრული ენერგია, კინეტიკური $\frac{mv^2}{2}$ და პოტენციალური ენერგიის U -ს ჯამი, ამიტომ

¹ 5 და 6 პარაგრაფში ბოლცმანის მუდმივა აღნიშნულია k_B -ით, რომ არ ავეუროთ k ტალღურ ვექტორთან.

$$\mathbf{v} \nabla_r f_o(E+u) = \frac{1}{k_n T} f_o \mathbf{v} (-\nabla_r U) = \frac{1}{k_o T} \cdot f_o \cdot (\mathbf{v} \mathbf{F}),$$

$$\frac{1}{m} \mathbf{F} \nabla_v f_o(E+U) = -\frac{1}{m} \mathbf{F} \cdot f_o \cdot \frac{m \mathbf{v}}{k_o T} = \frac{1}{k_o T} f_o (\mathbf{v} \mathbf{F}).$$

ამრიგად

$$(\mathbf{v} \nabla_r f_o) + \frac{1}{m} (\mathbf{F} \nabla_v f_o) = 0$$

შესაბამისად ამისა გვექნება:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_n}{\partial t} \right)_{\text{ლაჯ.}} &= \int \{f_o(E') W(v's) - f_o(E) W(v's')\} d\gamma = \\ &= f_o(E) \int (W(v's) - W(v's')) d\gamma' = 0 \quad (E' = E). \end{aligned}$$

რადგანაც ინტეგრალი ნულის ტოლია ნებისმიერი $d\gamma'$ -თვის, ამიტომ

$$W(v's) = W(v's').$$

რთდესაც ელექტრონებზე მოქმედებს ox ღერძის გასწვრივ ელექტრული ველი და ტემპერატურის გრადიენტი არა გვაქვს, მაშინ ლორენცის (8.17) ამოხსნა შეგვიძლია ჩავწეროთ ზოგადად შემდეგი სახით:

$$f - f_o = f_1 = -\frac{\partial f_o}{\partial E} \chi(E) \mathbf{v}_x, \quad (8.56)$$

სადაც $\chi(E)$ ცნობილი ფუნქციაა ენერგიისა. ბოლცმანის განტოლებაში შემავალი დაჯახების წევრი

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ლაჯ.}} = \int W(v's') (f(v'r) - f(vr)) d\gamma'$$

შეიძლება გარდავქმნათ შემდეგი სახით:

თანახმად (8.56) ფორმულისა,

$$f(v'r) = f_o(E) - \frac{\partial f}{\partial E} \chi(v') v'_x$$

და

$$f(vr) = f_o(E) - \frac{\partial f}{\partial E} \chi(v) \cdot \mathbf{v}_x,$$

ამიტომ

$$f(v'r) - f(vr) = -\frac{\partial f}{\partial E} \chi(v) \mathbf{v}_x \cdot (1 - \cos \theta) = -f_1 (1 - \cos \theta),$$

სადაც θ გაბნევის კუთხეა. ამრიგად

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ლაჯ.}} = -f_1 \int W(vv')(1-\cos\theta) d\Omega'.$$

$$\text{მეორე მხრივ } \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ლაჯ.}} = -\frac{f-f_0}{\tau} = -\frac{f_1}{\tau}.$$

ამ ორი ტოლობის შედარება გვაძლევს

$$\frac{1}{\tau} = \int W(vv')(1-\cos\theta) d\Omega'. \quad (8.57)$$

ხშირად გადასელის ალბათობის $W(vv')$ -ს ნაცვლად ხელსაყრელია ვიხმაროთ გაბნევის ეფექტური კვეთი $\sigma(\theta)$, რომელიც მოიცემა შემდეგი სახით:

$$\sigma(\theta) d\Omega = \frac{\text{ელექტრონების რიცხვი გადახრილი } \theta \text{ კუთხით სხეულოვანი } d\Omega \text{ კუთხ. შიგ. ელექტრონების რიცხვზე დაცემული 1 სმ}^2 \text{ ზედაპირზე იმავე დროში}}{}$$

ადვილად შეიძლება მოენახოთ კავშირი $W(vv')$ და $\sigma(\theta)$ -ს შორის, ამისათვის დავუშვათ, რომ V მოცულობაში ერთი გაბნევი ცენტრია და v სიჩქარით მოძრაავი N ელექტრონი, მაშინ 1 წამში, ალბულ ცენტრს, დაეცემა $\frac{N}{V}v$ ელექტრონი. აქედან გაბნეული ელექტრონების რიცხვი

ერთ წამში θ და $\theta+d\theta$ კუთხის შიგნით იქნება $\frac{N}{V}v\sigma(\theta) d\Omega$. მეორე

მხრივ, იგივე რიცხვი გაბნეული ელექტრონებისა შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი სახით: $NW(vv')d\Omega$. ამრიგად,

$$\frac{N}{V}v\sigma(\theta) d\Omega = NW(vv')d\Omega,$$

აქედან

$$W(vv') = W(\theta) = \frac{v\sigma(\theta)}{V}.$$

თუ $W(vv')$ -ს ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (8.57) ფორმულაში, მივიღებთ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi v}{V} \int \sigma(\theta)(1-\cos\theta) \sin\theta d\theta,$$

ანდა

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi v n_1 \int \sigma(\theta)(1-\cos\theta) \sin\theta d\theta, \quad (8.58)$$

სადაც

$$n_1 = \frac{N_1}{V}.$$

N_1 —გამბნევი ცენტრების რიცხვია.

მაგალითის სახით განვიხილოთ გაბნევა იონიზირებულ ცენტრზე (იონიზირებულ დონორზე). ამ შემთხვევაში r მანძილზე პოტენციალი მოიცემა კულონის კანონით:

$$u(r) = \frac{e^2}{\kappa r},$$

სადაც κ გარემოს დიელექტრიკული მუდმივაა.

მექანიკიდან ცნობილია, რომ კულონურ ველში დამუხტული ნაწილაკი მოძრაობს ჰიპერბოლის მრუდზე, მასთან „დამიზნების მანძილი“

$$b = \frac{e^2}{\kappa m v^2} \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}, \quad (8.59)$$

სადაც θ გაბნევის კუთხეა.

$$\text{ვინაიდან} \quad \sigma(\theta) 2\pi \sin \theta \, d\theta = 2\pi b / db,$$

თანხმად (8.59) ფორმულისა,

$$db = - \frac{e^2}{2\kappa m v^2} \cdot \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} d\theta.$$

ამიტომ ეფექტური კვეთისათვის მიიღება შემდეგი ფორმულა

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{e^2}{2\kappa m v^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}. \quad (8.60)$$

ეს უკანასკნელი ცნობილია რეზერფორდის ფორმულის სახელწოდებით: თუ $\sigma(\theta)$ -ს ამ მნიშვნელობას შევითანთ (8.58) ფორმულაში. ეს უკანასკნელი განშლადი გახდება $\theta=0$ წერტილში, რაც ფიზიკურად დაკავშირებულია იმასთან, რომ კულონური ველი ძალიან ნელა იცვლება მანძილის გადიდებით. განშლადობის თავიდან ასაცილებლად ფორმალურად მხედველობაში ღებულობენ აღებული იონის ველის ნაწილობრივ ეკრანირებას, რომელსაც ახდენენ გამტარებლობის ელექტრონები. ამ მიზნით შემოაყავთ მაქსიმალური დამიზნების მანძილი $b_{\text{მაქ.}} = \frac{1}{2} \cdot n_1^{-1/3}$. ეს უკანასკნელი წარმოადგენს საშუალო მანძილს მეზობელ იონებს შორის. $b_{\text{მაქ.}}$ ეთანადება გაბნევის კუთხე $\theta_{\text{მინ.}}$, რომელიც განისაზღვრება შემდეგი ფორმულიდან

$$\operatorname{ctg} \frac{\theta_{\text{მინ.}}}{2} = \frac{\kappa m v^2}{2e^2 \cdot n_1^{1/3}}.$$

იონის ველის ასეთი ეკრანიების გათვალისწინების შემთხვევაში (8.58) განტოლება ჩაიწერება ასე:

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi v n_1 \left(\frac{e^2}{2mnv^2} \right) \int_{\theta_{\min}}^{2\pi} \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

ეს ინტეგრალი მარტივად ამოიხსნება, შედეგი ასეთია:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi n_1 e^4}{x^2 m^2 v^3} \operatorname{erf} \left(1 + \left(\frac{x m v^2}{2e^2 n_1^{1/3}} \right)^2 \right). \quad (8.61)$$

ამ ფორმულას უწოდებენ კონველ-ვაისკოფის ფორმულას

რადგანაც ლოგარითმული წვერი ნელა ცვლადი ფუნქციაა v -სი, მიახლოებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\tau \sim E^2/2 = Bv^3. \quad (8.62)$$

ეს უკანასკნელი საშუალებას გვაძლევს ჩავატაროთ სიჩქარეების მიხედვით გასაშუალება (8.53) და (8.54) ფორმულებისა. მართლაც,

$$u_D = \frac{e}{3k_o T} \overline{v^2} \tau = \frac{e}{3x_o T} \cdot B \overline{v^5}.$$

როდესაც გაზი გადაგვარებული არ არის, სიჩქარის ნებისმიერი ხარისხის საშუალო მნიშვნელობა შეიძლება მოვნახოთ ბოლცმანის განაწილების გამოყენებით.

ეს გვაძლევს:

$$\overline{v^n} = v_T^n \cdot \frac{\left(\frac{n+1}{2} \right)!}{(1/2)!}, \quad (8.63)$$

სადაც

$$v_T = \sqrt{\frac{2k_o T}{m^*}}$$

ჩვენს შემთხვევაში $n=5$, ამიტომ

$$u_D \sim \frac{1}{N_1} m^{*-1/2} T^{3/2}. \quad (8.64)$$

მაშასადამე, იონებზე გაბნევისას ელექტრონის ძვრადობის კოეფიციენტი იზრდება ეფექტური მასის შემცირებით და ტემპერატურის გადიდებით. დადებით ან უარყოფით იონებზე ელექტრონების ან ზერელების გაბნევა საესებით ანალოგიურია რეზერფორდის გაბნევისა, მხოლოდ, თუ გავითვალისწინებთ იმ გარემოებას, რომ კრისტალში ველი შემცირებულია დიელექტრიკული მუდმივით. თანახმად ფორმულისა

$$\frac{m^* v^2}{2} = k_o T,$$

შეგვიძლია დავასკვნათ: მოცემულ ტემპერატურაზე რაც მეტია m^* , მით ნაკლებია v და, რაც მეტია v , თანახმად რეზერვუორდის გაბნევის ფორმულისა, მით უფრო მეტია გაბნევა, მაშასადამე, მით უფრო ნაკლებია ძვრადობა ($u_D \sim m^{*-1/2}$). მოცემული m^* -თვის, რაც მეტია ტემპერატურა, მით მეტია სიჩქარე და რაც უფრო მეტია სიჩქარე, მით უფრო ნაკლებია გაბნევა და, მაშასადამე, მით უფრო მეტია ძვრადობა ($u_D \sim T^{3/2}$). დასასრულს, რაც მეტია გაბნევი იონების კონცენტრაცია, მით მეტია გაბნევა და, მაშასადამე, მით უფრო ნაკლებია ძვრადობა ($u_D \sim \frac{1}{N_i}$).

განვიხილოთ ახლა (8.54) ფორმულა

$$A = \frac{u_H}{u_D} = \frac{\overline{v^2 \tau^2} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^2 \tau})^2},$$

$\tau = Bv^3$ მნიშვნელობის ჩასმა იძლევა

$$A = \frac{u_H}{u_D} = \frac{\overline{v^8} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^6})^2} \simeq 1,93.$$

მაშასადამე,

(8.65)

$$R \simeq 1,93 \cdot \frac{1}{nec}.$$

§ 6. გამტარებლობის ელემენტრონების (ზვამდეზის) გაბნევა დამუხტულ და ნეიტრალურ მინარეზებზე და სათანადო რელაქსაციის დროის გამოთვლა

წინა პარაგრაფში განხილული იყო ელექტრონების (ხვრელები) გაბნევა მინარეზ იონებზე, სადაც ინტეგრალის განშლადობის თავიდან ასაცილებლად შეტანილი იყო მაქსიმალური დამიზნების მანძილი $s_{\text{max}} = \frac{1}{2} n_i^{-1/2}$,

რაც ფაქტიურად იონის ეკრანიების გათვალისწინების ეკვივალენტურია. ამ პარაგრაფში ჩვენ ისევ დავებრუნდებით ამ საკითხს და გავარჩევთ უფრო დეტალურად. აღვნიშნოთ n -ით თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაცია მინარევი იონების არარსებობის შემთხვევაში და $n'(r)$ -ით — მინარევი იონების ველის გათვალისწინების დროს. ცხადია, დადებითი იონი თავის ელექტრული ველით თავისუფალი ელექტრონების განაწილებას ცვლის ისე, რომ იონის მახლობლობაში თავისუფალი ელექტრონების სიმკვრივე იზრდება. ამიტომ $e(n'(r) - n)$ იქნება მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე r წერტილში. თუ იონის ველის პოტენციალს აღვნიშნავთ $\varphi(r)$ -ით, პუასონის განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\Delta\varphi = \frac{4\pi e}{x}(n' - n). \quad (8.66)$$

ამასთან

$$r \rightarrow 0 \quad \lim \varphi \rightarrow \frac{e}{xr}.$$

სადაც x არის გარემოს დიელექტრიკული მუდმივა.

თავისუფალი ელექტრონების სიმკვრივე მოცემულია შემდეგი ფორმულით:

$$n = \int f_0(E) G(E) dE,$$

სადაც f_0 არის ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია და $G(E)$ —მდგომარეობათა სიმკვრივე ზონის კიდის მახლობლად. $f_0(E)$ და $G(E)$ -ს მნიშვნელობების ჩასმა გვაძლევს

$$n = \frac{(2m^* k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot F_{1/2}(z), \quad (8.67)$$

სადაც $F_{1/2}(z)$ არის ფერმის ინტეგრალი, ხოლო $z = \frac{\mu_0}{k_B T}$ — იონის ველის

პოტენციალის გათვალისწინება ტოლფასია განაწილების ფუნქციაში $\mu_0 \rightarrow \mu_0 + e\varphi$. შესაბამისად ამისა, თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაციისათვის მიიღება შემდეგი ფორმულა:

$$n' = \frac{(2m^* k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \cdot F_{1/2}(z + u), \quad (8.68)$$

სადაც

$$u = \frac{e\varphi}{k_B T},$$

როდესაც $e\varphi \ll \mu_0$, ფერმის ინტეგრალი შეიძლება დავშალოთ მწყრივად n -ს ხარისხებად, ეს გვაძლევს

$$n' = n + \frac{(2m^* k_B T)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} F'_{1/2}(z) \cdot u.$$

ამ უკანასკნელის შეტანა პუასონის განტოლებაში გვაძლევს:

$$\Delta\varphi = q^2\varphi, \quad (8.69)$$

სადაც

$$q^2 = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \frac{e^2 \cdot m^{*3/2} (k_B T)^{1/2}}{x \hbar^3} F'_{1/2}(z). \quad (8.70)$$

(8.69) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს შემდეგი ფუნქცია

$$\varphi = \frac{e}{xr} \cdot e^{-qr} \quad (8.71)$$

თანახმად ამ ფორმულისა, როდესაც $r = \frac{1}{q} = r_0$ -ს პოტენციალი φ ეცემა e -ჯერ, ამიტომ r_0 სიდიდეს უწოდებენ დეზაის ეკრანირების რადიუსს. განვსაზღვროთ r_0 -ის სიდიდე ელექტრონული გაზის სუსტი და ძლიერი გადაგვარების შემთხვევაში.

ა) არაგადაგვარებული ელექტრონული გაზი. ამ შემთხვევაში

$$F_{1/2}(z) = \frac{d}{dz} \int_0^{\infty} e^{z-x} \cdot x^{1/2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} e^z,$$

$$e^z = e^{\frac{\mu_0}{k_0 T}} = \frac{4\pi^3 n \hbar^3}{(2\pi m^* k_0 T)^{3/2}}, \quad (8.72)$$

ამრიგად

$$q'' = \frac{4 \sqrt{2}}{\pi} \cdot \frac{e^2 m^{*3/2} \cdot (k_0 T)^{1/2}}{\chi \hbar^3} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{4\pi^3 n \hbar^3}{(2\pi m^* k_0 T)^{1/2}} =$$

$$= \frac{4\pi e^2 n}{\chi \cdot k_0 T},$$

ეკრანირების რადიუსი

$$r_0 = \frac{1}{q} = \sqrt{\frac{\chi k_0 T}{4\pi e^2 n}}. \quad (8.73)$$

ეს უკანასკნელი ემთხვევა დეზაის რადიუსს (8.70).

ბ) გადაგვარებული ელექტრონული გაზი. ამ შემთხვევაში

$$F'_{1/2}(z) = z^{1/2} = \frac{\pi \hbar}{(2\pi m^* k_0 T)^{1/2}} \cdot \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{1/2}.$$

ეკრანირების რადიუსი

$$r_0 = \frac{1}{q} = \left(\frac{\chi \hbar^2}{4m^* e^2} \left(\frac{\pi}{3n} \right)^{1/2} \right)^{1/2}. \quad (8.74)$$

რელაქსაციის დროს

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi n_1 \int \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta.$$

ბორნის მოსახლეობაში

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{e^2 / \chi}{m^* v^2 (1 - \cos \theta) + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}} \right)^2. \quad (8.75)$$

ინტეგრირების შედეგია

$$\tau = \frac{\chi^2 m^{*2} v^3}{2\pi e^4 n_1 \Phi(\eta)} = \frac{\sqrt{2m^*} \chi^2 \cdot 2^{3/2}}{\pi e^4 \cdot n_1 \Phi(\eta)}. \quad (8.76)$$

სადაც

$$E = \frac{m^* v^2}{2} \quad \Phi(\eta) = \ln(1 + \eta) - \frac{\eta}{1 + \eta}$$

$$\eta = \frac{4m^* v^2}{\hbar^2 q^2} = \frac{8m^* E}{\hbar^2 q^2} \quad (8.77)$$

რადგანაც $\Phi(\eta)$ ნელად ცვლადი ფუნქციაა, ამიტომ პირველი მიახლოებით გვაქვს

$$\tau \sim E^{3/2}.$$

როგორც ამას ადგილი ჰქონდა კონველ-ვანისკოფის ფორმულაში; დასასრულს განვიხილოთ ელექტრონების გაბნევა ნეიტრალურ მინარევე ატომზე. ამ დროს მიახლოებით შეიძლება განვიხილოთ ნელი სიჩქარის ელექტრონების გაბნევა წყალბადის ატომზე, რომელიც იმყოფება x დიელექტრიკულ გარემოში.

თუ გასაბნევი ელექტრონების სიჩქარე მცირეა, მაშინ გაბნევას აქვს სფერული სიმეტრია და კვანტურ-მექანიკური თეორიის ფორმულაში საკმარისია მხედველობაში მივიღოთ ნულოვანი ფაზა. საბოლოო შედეგი ასეთია

$$\frac{1}{\tau} = \frac{20\pi\hbar^3}{m^* e^2} \cdot n_0 \quad (8.78)$$

სადაც n_0 —მინარევი ნეიტრალური ატომების სიმკვრივეა.

§ 7. მლმმტრონების (ხვამლუბის) გაბნევა ატომურ კრისტალში მისმარის სითმურ ჩხმმმბზმ

როგორც ვიცით, თითოეული ზონის შიგნით ელექტრონის მდგომარეობა აიწერება k ტალღური ვექტორით. ელექტრონის ენერგია რთული ფუნქციაა k -სი, რომლის კონკრეტული სახე ჩვენთვის ცნობილი არ არის, მაგრამ ზონის კიდის მახლობლად, ეფექტური მასის მიახლოებაში, მოცემულია შემდეგი ფორმულით:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},$$

ე. ი. ამ შემთხვევაში კრისტალში ელექტრონი განიხილება როგორც კლასიკური ნაწილაკი m^* ეფექტური მასით, რომლის სიჩქარე მოცემულია ფორმულით

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}.$$

ამიტომ შემდეგში ყველა სიდიდე მოცემული იქნება r , k და t ცვლადებში. ასე მაგალითად, ბოლცმანის განტოლებაში შემაჯალი დაჯახების წვერი, პულის პრინციპის გათვალისწინებით, უნდა დაიწეროს შემდეგი სახით:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ლაჯ.}} = \sum_{k'} (W(k'k)f(k')(1-f(k)) - W(kk')f(k)(1-f(k'))).$$

აქ პირველი წევრი ეთანადება $k' \rightarrow k$ გადასვლას, მამრავლი $1-f(k)$ მაჩვენებელია იმისა, რომ მდგომარეობა k არ არის დაკავებული ელექტრონით. მეორე წევრი ეთანადება $k \rightarrow k'$ გადასვლას, სადაც მამრავლი $(1-f(k'))$ მაჩვენებელია იმისა, რომ k' მდგომარეობა დაკავებული არ არის ელექტრონით, ვინაიდან გადასვლის ალბათობები $W(kk') = W(k'k)$, ამიტომ

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ლაჯ.}} &= \sum_{k'} (W(k'k)f(k') - W(kk')f(k)) = \\ &= \sum_{k'} W(k'k)(f(k') - f(k)). \end{aligned} \quad (8.79)$$

ვინაიდან პაულის პრინციპი ერთნაირ გავლენას ახდენს ორივე მიმართულებით გადასვლებზე $k' \rightleftharpoons k$, ამიტომ საბოლოო შედეგზე გავლენას არ ახდენს. განაწილების ფუნქცია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$f(k) = f_0(E) - \frac{\partial f_0}{\partial E} \chi(E) \cdot k = f_0(E) + f_1(k),$$

მაშინ

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ლაჯ.}} &= \sum_{k'} W(k'k)(f_1(k') - f_1(k)) = \\ &= -f_1 \sum_{k'} W(k'k) \left(1 - \frac{k'_x}{k_x}\right) = \\ &= -f_1 \sum_{k'} W(k'k)(1 - \cos \theta) = -\frac{f_1}{\tau}, \end{aligned}$$

სადაც

$$\frac{1}{\tau(k)} = \sum_{k'} W(k'k)(1 - \cos \theta) \quad (8.80)$$

$$k_{\parallel} = k \cos \theta \text{ და } k'_x = k' \cos \theta.$$

რადგანაც ელექტრონს გააჩნია ელექტრული მუხტი e , ამიტომ მის მოძრაობას მუდმივი სიჩქარით ეთანადება ელექტრული დენი გარეშე ველის არარსებობის შემთხვევაშიც. სხვანაირად რომ ვთქვათ, იდეალურ პერიოდულ ველში ელექტრული წინააღმდეგობა ნულის ტოლია. სასრულო სიდიდის ელექტრული წინააღმდეგობა მიიღება მესერის დამახინჯებებზე ელექტრონების (ხ რელეების) გაბნევის შედეგად.

ამ პარაგრაფში ჩვენ განვიხილავთ ელექტრონების (ხვრელების) გაბნევის მესერის სითბურ რხევებზე მარტივი ატომური მესერის შემთხვევაში, რისთვისაც გამოვიყენებთ დეფორმადი იონების მეთოდს. ამ მეთოდის შინაარსი მდგომარეობს შემდეგში:

ელექტრონის პოტენციალური ენერგია r წერტილში, რომელიც დეფორმირებამდე იყო $V(r)$, დეფორმაციის შემდეგ გადაიტანება $r+u$ წერტილში, სადაც დეფორმაციამდე პოტენციალური ენერგია იყო $V(r+u)$, ამიტომ სხვაობა

$$\Delta V = V(r) - V(r+u) = -(\text{grad} V \cdot u) \quad (8.81)$$

შეიძლება განხილული იქნეს როგორც შეშფოთების ენერგია. მარტივი კუბური მესერის შემთხვევაში, რომელსაც გააჩნია ინვერსიის ცენტრი, კრისტალის ნებისმიერი წერტილის წანაცვლება (სითბური რხევების შედეგად) მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$u = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{qj} c_{qj} (a_{qj} e^{iqr} + a_{qj}^* e^{-iqr}). \quad (8.82)$$

შეშფოთების ენერგიის (8.81)-ს გამოყენებით გამოვთვალოთ გადასვლის ალბათობა $W(k'k)$, რისთვისაც გამოვიყენებთ დირაკის კვანტური გადასვლების თეორიას. განვიხილოთ სისტემა, რომელიც შედგება კრისტალის პერიოდულ ველში მოძრავი ერთი ელექტრონისა და ნორმალური რხევებისაგან. ვთქვათ, θ_{qj} არის ნორმალური კოორდინატები და ψ_{Nqj} ოსცილატორის ტალღური ფუნქციები. მაშინ შრედინგერის შეშფოთების თეორიის მიხედვით აღებული სისტემის ტალღური ფუნქცია ურთიერთქმედების გაუთვალისწინებლობის შემთხვევაში, წარმოადგენს ელექტრონის ტალღური ფუნქციისა (ბლოხის ფუნქციისა) და ოსცილატორის ტალღური ფუნქციების ნამრავლს

$$\psi_{k, Nqj}^0 = \psi_k(r) \prod_{qj} \psi_{Nqj}(\theta_{qj}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_k(r) e^{ikr} \prod_{qj} \psi_{Nqj}(\theta_{qj}), \quad (8.83)$$

ამასთან

$$\int |u_k|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (8.84)$$

ინტეგრირება ხდება კრისტალის ერთი უჯრედის შიგნით.

დირაკის თეორიის მიხედვით, შეშფოთებული სისტემის ტალღური ფუნქცია მოიცემა შემდეგი სახით

$$\begin{aligned} \psi(t) = & \sum_{k' N'_{qj}} C(k' N'_{qj} t) \psi_{k' N'_{qj}}^0 \times \\ & \times e^{-\frac{i}{\hbar} \left(E_{k'} + \sum_{qj} \left(N'_{qj} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{qj} \right) \cdot t}, \end{aligned} \quad (8.85)$$

სადაც $C(k' N'_{qj} t)$ დაშლის კოეფიციენტებია და

$$E_k + \sum_{aj} \left(N'_{aj} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{aj} = E_{k'N'_{aj}}. \quad (8.86)$$

შეშფოთებული სისტემის სრული ენერგია, რომელიც შედგება ელექტრონის ენერგიისა და ყველა ნორმალური რხევის ენერგიათა ჯამისაგან. ღირაკის თეორიის მიხედვით დაშლის კოეფიციენტები $C(k'N'_{aj}t)$ აკმაყოფილებდნენ შემდეგ საწყის პირობებს: თუ $t=0$ მომენტში ელექტრონი იმყოფებოდა k მდგომარეობაში და ნორმალური რხევები ხასიათდებიან N_{aj} რიცხვებით, მაშინ

$$C(k'N'_{aj}0) = \begin{cases} 1 & \text{როდესაც } k'=k \text{ და } N_{aj}=N'_{aj} \\ 0 & \text{დანარჩენ შემთხვევაში.} \end{cases} \quad (8.87)$$

ღირაკის თეორიის მიხედვით $C(kN_{aj}t)$ აკმაყოფილებენ შემდეგ განტოლებას

$$i\hbar \frac{d}{dt} C(k'N'_{aj}t) = \langle k'N'_{aj} | \Delta V | kN_{aj} \rangle \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[E_{k'} - E_k + \sum_{aj} (N'_{aj} - N_{aj}) \hbar \omega_{aj} \right] \cdot t \right\}, \quad (8.88)$$

სადაც

$$\langle k'N'_{aj} | \Delta V | kN_{aj} \rangle = \int \psi_{k'N'_{aj}}^* \Delta V \psi_{kN_{aj}} d^3r \prod_{qj} d\theta_{qj}. \quad (8.89)$$

აქ ΔV არის შეშფოთების ენერგია, რომელიც მოცემულია (8.81) ფორმულით, ხოლო $\langle k'N'_{aj} | \Delta V | kN_{aj} \rangle$ — გადასვლის $kN_{aj} \rightarrow k'N'_{aj}$ მატრიცული ელემენტები. აღვიღოთ შეიძლება ჩვენება იმისა, რომ ელექტრონი ურთიერთმოქმედებს მხოლოდ ერთ სიგრძეზე შტოსთან, რომლისათვის $C_{qj} \parallel q$ -ს. ამ დროს მატრიცული ელემენტები ნულისაგან განსხვავებული მიიღება ორ შემთხვევაში.

ა) როდესაც ელექტრონის ტალღური ვექტორი და ენერგია გადასვლის შემდეგ ტოლია

$$k' = k + q \text{ და } E_{k'} = E_k + \hbar \omega_q, \quad (8.90)$$

ფონონების რიცხვი $N'_q = N_q + 1$.

ამ პროცესს ეთანადება ფონონების შთანთქმა ელექტრონის მიერ

ბ) როდესაც ელექტრონის ტალღური ვექტორი და ენერგია გადასვლის შემდეგ ტოლია

$$k' = k - q \text{ და } E_{k'} = E_k - \hbar \omega_q, \quad (8.91)$$

ფონონების რიცხვი $N'_q = N_q + 1$.

ამ პროცესს ეთანადება ფონონების გამოსხივება ელექტრონის მიერ. როგორც ვხედავთ, როგორც შთანთქმის ისე გამოსხივების დროს ადგილი აქვს ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონს.

პირველ შემთხვევაში მატრიცული ელემენტისათვის მიიღება შემდეგი გამოსახულება

$$\langle k' N'_q | \Delta \vee | k N_q \rangle = -\frac{2i}{3} \frac{Cq}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar N_q}{2M\omega_q}}, \quad (8.92)$$

მეორე შემთხვევაში

$$\langle k' N'_q | \Delta \vee | k N_q \rangle = \frac{2i}{3} \frac{Cq}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{\hbar(N_q+1)}{2M\omega_q}}, \quad (8.93)$$

სადაც

$$C \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \int |u_k|^2 d^3r = \frac{\hbar^2}{2ma^2},$$

$$a \sim 10^{-8} \text{ სმ, ამიტომ } C \simeq 5eV,$$

ზოგადი თეორიის მიხედვით, გადასვლის ალბათობა ერთ წამში, გადასვლის მატრიცულ ელემენტთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით:

$$W(kk') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle k' N'_q | \Delta \vee | k N_q \rangle \right|^2 \delta(E_{k'} - E_k \mp \hbar\omega_q), \quad (8.94)$$

შთანთქმის შემთხვევაში

$$W^+(kq) = W(q) N_q \delta(E_{k+q} - E_k - \hbar\omega_q), \quad (8.95)$$

გამოსხივების შემთხვევაში

$$W^-(kq) = W(q) (N_q + 1) \delta(E_{k-q} - E_k + \hbar\omega_q), \quad (8.96)$$

სადაც

$$W(q) = \frac{4\pi}{9N} \cdot \frac{C^2 q^2}{M\omega_q}. \quad (8.97)$$

რელაქსაციის დროის გამოსათვლელად ვუშვებთ, რომ სამართ-
ლიანია მიახლოება $E_k \simeq \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ და ელექტრონი ურთიერთმოქმედებს
ძირითადად სიგრძით აკუსტიკურ რხევებთან, რომლისთვისაც სამართლია-
ნია ტოლობა $\omega_q = v_o q$, სადაც v_o არის სიგრძითი ტალღების (ბგერის) გა-
ვრცელების სიჩქარე.

დავწეროთ ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონები

$$k' = k \pm q \text{ და } E_{k'} = E_k \pm \hbar\omega_q \text{ ანდა } \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar\omega_q.$$

ამ ორი განტოლებიდან k' -ს გამორიცხვა გვაძლევს:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} (k \pm q)^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \hbar v_o q.$$

აქედან

$$q = \mp 2\hbar \cos \vartheta \pm \frac{2m^* v_0}{\hbar}, \quad (8.98)$$

სადაც ϑ არის k და k' -ს შორის კუთხე. აღვილი საჩვენებელია, რომ მეორე წევრი პირველთან შედარებით მცირეა, ამიტომ შეიძლება მისი უგულებელყოფა, მართლაც

$$\frac{m^* v_0}{\hbar k} = \frac{m^* v_0}{p} \simeq \frac{m^* v_0}{\sqrt{m^* k_0 T}} = \sqrt{\frac{T_0}{T}},$$

სადაც კვაზი-იმპულსური $p^* = \hbar k$ შეცვლილია საშუალო სითბური მნიშვნელობით T ტემპერატურაზე, ხოლო $T_0 = \frac{m^* v_0^2}{k_0}$. თუ დავუშვებთ $m^* = 10^{-28}$ გრ. და $v_0 = 2 \cdot 10^5$ სმ/წმ. ვღებულობთ $T_0 \simeq 1^\circ K$. ამიტომ ყველა ტემპერატურაზე $T > 1^\circ K$ მეორე წევრის უგულებელყოფა შესაძლებელია, ამრიგად

$$q = \mp 2\hbar \cos \vartheta. \quad (8.99)$$

ეს მიახლოება მაჩვენებელია იმისა, რომ ენერგიის მუდმივობის კანონის თანახმად, ელექტრონი გამოასხივებს ან შთანთქმავს ფონონს იმპულსით $q \simeq \hbar$. მასთან (8.99) ტოლობიდან ვღებულობთ

$$q_{\text{მინ.}} = 0 \text{ და } q_{\text{მაქ.}} = 2\hbar.$$

ოთახის ტემპერატურაზე $\hbar \sim 10^7$ სმ, ხოლო ტალღური ვექტორი q დეზაის თეორიის თანახმად

$$q_0 = \left(\frac{6\pi^3}{\Omega_0} \right)^{1/3} \sim 10^8 \text{ სმ.}$$

ე. ი. $q_{\text{მაქ.}} \ll q_0$. ამრიგად, ელექტრონები ურთიერთქმედებენ ძირითადად გრძელტალღოვან ფონონებთან, რაც ნიშნავს ფონონის ენერგიის, ანდა რაც იგივეა, ელექტრონის არადრეკადობის გაბნევის უგულებელყოფას. დრეკადი გაბნევის შემთხვევაში

$$\begin{aligned} \delta(E_k \pm q - E_{k'}) &= \delta \left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m^*} \cos \vartheta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \right) = \\ &= \frac{m^*}{\hbar^2 k q} \delta \left(\frac{q}{2k} \pm \cos \vartheta \right). \end{aligned} \quad (8.100)$$

ეს მიახლოება საშუალებას გვაძლევს გამოვითვალოთ რელაქსაციის დრო. ელექტრონის მესერის რხევებთან გაბნევის დროს $k' = k \pm q$, სადაც ზედა ნიშანი ეთანადება ფონონების შთანთქმას, ქვედა — ფონონების გამო-სხივებას. ამ შემთხვევაში (8.80) ფორმულა ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\frac{1}{\tau} = - \sum_q W^+(kq) \frac{q_x}{k_x} + \sum_q W^-(kq) \frac{q_x}{k_x}. \quad (8.101)$$

აქამდე q -თი შეიძლება შევცვალოთ ინტეგრირებით, ამისათვის

$$\sum_q \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q^2 dq \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi.$$

თანახმად ნახ. 74-ისა, შეგვიძლია დავწეროთ

$$\cos \alpha = \cos \vartheta \cos \beta + \sin \vartheta \sin \beta \cos \varphi, \quad (8.102)$$

$$q_x = q \cos \alpha \text{ და } k_x = k \cos \beta.$$

ამ მნიშვნელობების შეტანა რელაქსაციის დროის ფორმულაში გვაძლევს

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = & - \frac{V}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \frac{m^2}{\hbar k^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q^2 dq \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \left\{ W(q) N_q \delta \left(\frac{q}{2k} + \cos \vartheta \right) \frac{\cos \alpha}{\cos \beta} - \right. \\ & \left. - W(q) (N_q + 1) \delta \left(\frac{q}{2k} - \cos \vartheta \right) \frac{\cos \alpha}{\cos \beta} \right\}, \end{aligned}$$

რადგანაც

$$\int_0^{2\pi} \cos \alpha d\varphi = 2\pi \cos \vartheta \cos \beta,$$

მივიღებთ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{V}{8\pi^2} \times$$

$$\times \frac{m^2}{\hbar^2 k^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} W(q) (2N_q + 1) q^2 dq. \quad (8.103)$$

ნახ. 74.

ამ [ინტეგრალის გამოსათვლელად საჭიროა ვიცოდეთ N_q . ელექტრონული პროცესების შემთხვევაში ფონონების წონასწორული განაწილება იცვლება, მაგრამ გარკვეული მიახლოებით იგი შეიძლება აღვწეროთ პლანკის ფორმულით:

$$N_q = \langle N_q \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}} - 1}.$$

მაგრამ $\frac{\hbar \nu_0 q}{k_0 T} \simeq \sqrt{\frac{T_0}{T}} \ll 1$, ამიტომ მიახლოებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$N_q = \langle N_q \rangle \simeq \langle (N_q + 1) \rangle = \frac{k_0 T}{\hbar \nu_0 q}.$$

თუ N_q -ს ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (8.103) ფორმულაში და $W(q)$ -თვის ავიღებთ (8.97) გამოსახულებას, მარტივი ინტეგრირების შედეგად მივიღებთ:

$$\tau = \frac{\tau_0}{\sqrt{E}}, \quad (8.104)$$

სადაც

$$\tau_0 = \frac{\left(\frac{9\pi}{4}\right) (M v_0^2 \hbar^3)}{\Omega C_0^2 m^* k_0 T} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2m^*}}. \quad (8.105)$$

τ -ს ამ მნიშვნელობის ჩასმა (8.53) და (8.54) ფორმულებში გვაძლევს:

$$u_D = \frac{e}{3kT} \overline{v^2 \tau} = \frac{e}{3k_0 T} \sqrt{\frac{2}{m^*}} \frac{\tau_0}{\sqrt{m^*}} \overline{v} \sim m^{*-5/2} \cdot T^{-3/2}$$

$$A = \frac{u_H}{u_D} = \frac{\overline{v^2 \tau^2} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^2 \tau})^2} = \frac{\overline{v^2}}{(\overline{v})^2} = \frac{3\pi}{8} \simeq 1,18.$$

ამრიგად

$$R = \frac{3\pi}{8} \cdot \frac{1}{nec}. \quad (6.106)$$

§ 8. გამტარუნარიანობის ელემენტარული (ხვედრების) ჩელაძნაძიის დრო იონური ძრისტაღებში

განვიხილოთ იონური კრისტალი, მაგალითად NaCl , მესერი შედგება დაღებითი და უარყოფითი იონებისაგან. რხევის სპექტრი შედგება სამი აკუსტიკური და სამი ოპტიკური შტოსაგან. ვინაიდან ამ კრისტალს გააჩნია სიმეტრიის ცენტრი, ამიტომ წანაცვლების ვექტორი u_k^+ k -ური ნაწილაკისა n უჭრედში, a_{qj} ნორმალურ კოორდინატებთან დაკავშირებულია შემდეგი სახით

$$u_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{qj} e_{qj}^k (a_{qj} e^{iqa_n} + a_{qj}^* e^{-iqa_n}), \quad (8.107)$$

სადაც $k=1,2$ —დაღებითი და უარყოფითი იონების შესაბამისად, N

უჯრედების საერთო რიცხვია კრისტალის ძირითად არეში, $(V = N \cdot 2a^3) \cdot e_{qj}$ — პოლარიზაციული ვექტორია, რომელიც აკმაყოფილებს შემდეგ ტოლობას

$$m_1 e_{qj}^{(1)} + m_2 e_{qj}^{(2)} = 0.$$

რადგანაც e_{qj}^k ვექტორები ორთონორმირებულია, ამიტომ

$$m_1 (e_{qj}^{(1)})^2 + m_2 (e_{qj}^{(2)})^2 = m_1 + m_2.$$

ამ განტოლებათა დასაკმაყოფილებლად აუცილებელია

$$e_{qj}^{(1)} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} i_j \quad \text{და} \quad e_{qj}^{(2)} = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}} i_j. \quad (8.108)$$

i_j — არის ერთეული ვექტორი მოცემული პოლარიზაციისათვის. იონურ კრისტალებში გამტარებლობის ელექტრონები უფრო ძლიერად ურთიერთ-მოქმედებენ ოპტიკურ რხევებთან, ვიდრე აკუსტიკურ რხევებთან. ეს დაკავშირებულია იმასთან, რომ დადებითი და უარყოფითი იონების რხევები წარმოშობენ დიპოლურ მომენტებს, რომელთანაც ელექტრონები ძლიერად მოქმედებენ. გრძელტალღოვანი ოპტიკური რხევების შემთხვევაში შეიძლება შემოვიტანოთ კრისტალის პოლარიზაციის ვექტორი

$$P(r) = \frac{ze}{2a^3} (u_r^{(1)} - u_r^{(2)}). \quad (8.109)$$

u_r^k მოცემულია (8.107) ფორმულით, სადაც $a_n \rightarrow r$ -თ. u_r^k -ს მნიშვნელობის შეტანა გვაძლევს:

$$P(r) = \frac{ze}{2a^3} \cdot \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{m_1 m_2}} \sum_{jq} i_j \cdot (a_{qj} e^{iqr} + a_{qj}^* e^{-iqr}). \quad (8.110)$$

პოლარიზაციული ტალღები (7.110) გვაძლევენ მოცულობაში ბმული მუხტების სიმკვრივეს $\rho = -\operatorname{div} P$, რომელიც წარმოადგენს ელექტრული ველის წყაროს. ამ ველის პოტენციალი Φ აკმაყოფილებს პუასონის განტოლებას

$$\begin{aligned} \Delta \Phi &= -4\pi\rho = 4\pi \operatorname{div} P(r) = \\ &= i \frac{2\pi ze}{a^3 \sqrt{N}} \cdot \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{m_1 m_2}} \sum_{qj} (i_j q) (a_{qj} e^{iqr} - a_{qj}^* e^{-iqr}). \end{aligned} \quad (8.111)$$

ის გარემოება, რომ მარჯვენა მხარე ნულისაგან განსხვავებულია, როდესაც $i_j \parallel q$ -ს, მიგვითითებს იმაზე, რომ ელექტრული ველი იქმნება მხოლოდ სივრცითი ოპტიკური რხევების შედეგად.

(7.111) განტოლების ამოხსნას წარმოადგენს ფუნქცია

$$\Phi = -i \frac{2\pi ze}{a^3 \sqrt{\pi}} \cdot \frac{m_1 + m_2}{\sqrt{m_1 m_2}} \cdot \sum_q \frac{1}{q} (a_q e^{iqr} - a_q^* e^{-iqr}), \quad (8.112)$$

ახლა მოვწახვთ ელექტრონის გადასვლის ალბათობა $k \rightarrow k'$, როდესაც ხდება მისი გარეგანი პოლარიზაციულ ტალღებზე, ამისათვის საჭიროა სიდიდე (8.112) განვიხილოთ როგორც შემფოთების პოტენციალი. ელექტრონის მდგომარეობა მიახლოებით შეგვიძლია აღვწეროთ ბრტყელი ტალღით. ასეთი სახის ინტეგრალები მრავალჯერ შეგვხვედრია, ამიტომ მოვიყვანოთ საბოლოო შედეგს: შემფოთების ენერგიის (8.112) მატრიცული ელემენტის გამოსახულებაში ინტეგრირება ელექტრონის კოორდინატებით გვაძლევს ნულს, გარდა იმ შემთხვევისა, როდესაც

$$k' = k \pm q.$$

ამ დროს ინტეგრალი ერთი ტოლია. ზედა ნიშანი (+) ეხება ფონონების შთანთქმას, ხოლო ქვედა ნიშანი (—) — ფონონების გამოსხივებას.

სათანადო მატრიცული ელემენტებია

$$\langle N_q - 1 | a_q | N_q \rangle = \sqrt{\frac{\hbar N_q}{2(m_1 + m_2)\omega_q}} \quad (8.113)$$

და

$$\langle N_q + 1 | a_q^* | N_q \rangle = \sqrt{\frac{\hbar(N_q + 1)}{2(m_1 + m_2)\omega_q}}. \quad (8.114)$$

საბოლოოდ — $e\Phi$ შემფოთებით გამოწვეული გადასვლის მატრიცული ელემენტებია

$$\begin{aligned} & \langle N'_q | e^{-e\Phi} | N_q \rangle = \\ & \pm i \frac{2\pi z e^2}{a^3 \sqrt{NM}} \cdot \frac{1}{q} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_q}} \times \begin{cases} \sqrt{N_q} & \text{როდესაც } N'_q = N_q - 1 \\ \sqrt{N_q + 1} & \text{" } N'_q = N_q + 1 \end{cases} \quad (8.115) \end{aligned}$$

$$MI = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \text{ — იონების დაყვანილი მასა.}$$

ელექტრონის $k \rightarrow k'$ გადასვლის ალბათობისათვის გვექნება

$$W^+(kk') = W(q) \delta(E_{k+q} - E_k - \hbar\omega_q) N_q \quad (8.116)$$

$$W^-(kk') = W(q) \delta(E_{k-q} - E_k + \hbar\omega_q) N_q + 1 \quad (8.117)$$

სადაც

$$W(q) = \frac{(2\pi)^3}{NM} \cdot \frac{z^2 e^4}{a^3 q^2 \omega_q}. \quad (8.118)$$

რელაქსაციის დროის გამოსათვლელად შემოვიანაზღვროთ მცირე q -თი, ე. ი. მივიღოთ, რომ $\omega_q = \omega_0$, სადაც ω_0 არის სიგრძივი ოპტიკური შტოს ზღვრული სიხშირე. დავწეროთ ტალღური ვექტორისა და ენერგიის შენახვის კანონი

$$k' = k \pm q \text{ და } E_{k'} = E \pm \hbar\omega_0,$$

სადაც

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}.$$

პირველი ორი განტოლებიდან ვღებულობთ

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} \mp \hbar \omega_0 \pm \frac{\hbar^2 k q}{m^*} \cos \vartheta = 0,$$

სადაც ϑ არის კუთხე k და q -ს შორის.
აქედან

$$\begin{aligned} q_1 &= -k \cos \vartheta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \vartheta + \chi^2}, \\ q_2 &= +k \cos \vartheta \pm \sqrt{k^2 \cos^2 \vartheta - \chi^2}. \end{aligned} \quad (8.119)$$

ტალღური ვექტორი χ ეთანადება ელექტრონს, რომლის ენერგია $= \hbar \omega_0$, ე. ი

$$\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m^*} = \hbar \omega_0.$$

(8.119) განტოლებიდან შეიძლება დავადგინოთ q -ს მაქსიმალური მნიშვნელობები. განვიხილოთ ცალ-ცალკე მაღალი და დაბალი ტემპერატურის შემთხვევები.

1. მაღალი ტემპერატურა $k_0 T \gg \hbar \omega_0$ ანდა $k \gg \chi$. ამ შემთხვევაში (8.119) განტოლებიდან მიიღება

$$q_{\text{ან}} = 0 \text{ და } q_{\text{აქ}} = 2k.$$

რადგანაც ფონონის ენერგია $\hbar \omega_0$ ბევრად ნაკლებია $k_0 T$ -ზე, თითქმის ყველა ელექტრონისათვის გაბნევა შეგვიძლია ჩავთვალოთ როგორც დრეკადი და რელაქსაციის დროს გამოვთვალოთ (8.58)

ფორმულით, სადაც $2N_q + 1 \simeq \frac{2k_0 T}{\hbar \omega_0} + 1 \simeq 2 \frac{k_0 T}{\hbar \omega_0}$. მარტივი ინტეგრირების შედეგად მიიღება

$$\tau = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{M a^3 (\hbar \omega_0)^2 \cdot E^{1/2}}{e^3 e^4 m^{*1/2} k_0 T} \sim m^{*-1/2} \cdot T^{-1} E^{1/2}. \quad (8.120)$$

თუ τ -ს ამ მნიშვნელობას შევიტანთ (7.53) და (7.54) ფორმულებში, მივიღებთ:

$$\begin{aligned} u_D &= \frac{e^2}{3k_0 T} \overline{v^2 \tau} \sim T^{-1/2}, \quad m^{*-3/2}, \\ A = \frac{u_H}{u_D} &= \frac{\overline{v^2 \tau^2} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^2 \tau})^2} = \frac{\overline{v^4} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^3})^2} = \frac{15}{16} \cdot \frac{3\pi}{8} \simeq 1. \end{aligned} \quad (8.121)$$

დაბალი ტემპერატურა $k_B T \ll \hbar \omega_0$ ანდა $\hbar \omega_0 \ll k_B T$ ამ შემთხვევაში პრაქტიკულად გვექნება მხოლოდ ფონონების შთანთქმის პროცესი. ამიტომ (8.119) განტოლების პირველი ფორმულიდან ვღებულობთ

$$q_{\text{მფ.}} = \sqrt{k^2 + \kappa^2} - k \quad (\vartheta = 0), \quad (8.122)$$

$$q_{\text{მაქ.}} = \sqrt{k^2 + \kappa^2} + k \quad (\vartheta = \pi).$$

საჭიროა აღინიშნოს ის გარემოება, რომ დაბალი ტემპერატურის შემთხვევაში ელექტრონების გაბნევა დრეკადი არ არის, ამიტომ რელაქსაციის დროის განსაზღვრა (8.58) ფორმულით სამარჯლიანი არ არის. მაგრამ, როგორც დავიდოვმა და შშუშკევიჩმა გვიჩვენეს, რელაქსაციის დროის გამოსაკვლევად საკმარისია გათვლის მეთოდის სათანადო ცვლილება. საქმე შემდეგშია: $k_B T \ll \hbar \omega_0$ შემთხვევაში ელექტრონების აბსოლუტურ უმრავლესობას შეუძლია მხოლოდ შთანთქმის ფონონები. შედეგად ასეთი შთანთქმებისა, ელექტრონები გადადიან $\hbar \omega_0$ და $2\hbar \omega_0$ ენერგიის მდგომარეობებში. ასეთი ელექტრონები მაშინვე გამოსახივებენ ფონონებს, ამიტომ ასეთი სწრაფი შთანთქმისა და გამოსხივების გამო ელექტრონების ენერგია თითქმის აღარ შეიცვლება, სამაგიეროდ ტალღური ვექტორი საგრძნობლად შეიცვლება. ამ თვალსაზრისით ელექტრონების ურთიერთმოქმედება მესერის რხევებთან შეიძლება ჩაითვალოს როგორც დრეკადი და შემოვიტანოთ რელაქსაციის დროის (8.58) სახით. პირველი წევრი, რომელიც ასახავს ფონონების შთანთქმას, ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned} \delta(E_{k+q} - E_k + \hbar \omega_0) &= \delta \left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k q}{m^*} \cos \vartheta \right) = \\ &= \frac{m}{\hbar^2 k q} \delta \left(\frac{q^2 - \kappa^2}{2k q} + \cos \vartheta \right). \end{aligned}$$

საბოლოოდ τ -თვის ვღებულობთ

$$\frac{1}{\tau} = \frac{V}{8\pi^2} \cdot \frac{m^*}{\hbar^2 k^3} \int_{q_{\text{მფ.}}}^{q_{\text{მაქ.}}} \omega(q) N_q \frac{q^2 - \kappa^2}{q} \cdot q^2 dq. \quad (8.123)$$

დაბალ ტემპერატურაზე

$$N_q = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}} - 1} \simeq e^{-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}}.$$

თუ ჩავსვამთ τ -ს გამოსახულებაში N_q და $W(q)$ მნიშვნელობებს, მარტივი ინტეგრირების შემდეგ მიიღება

$$\frac{1}{\tau} = \frac{V}{8\pi^2} \cdot \frac{m^*(2\pi)^3 z^2 e^4}{h^2 k^3 N M u^6 w_0} \cdot e^{-\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T}} \times$$

$$\times \left\{ 2k \sqrt{k^2 + \chi^2} - \chi^2 \ln \frac{\sqrt{k^2 + \chi^2} + k}{\sqrt{k^2 + \chi^2} - k} \right\}. \quad (8.124)$$

რადგანაც $\frac{k}{\chi} \ll 1$, კვადრატულ ფრჩხილებში მოთავსებული სიდიდის დაშლა k/χ -ს ხარისხებად გვაძლევს

$$\tau = \frac{3 \sqrt{e}}{4\pi} \frac{M a^3 (\hbar \omega_0)^{3/2}}{z^2 e^4 m^{*1/2}} e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T}}. \quad (8.125)$$

როგორც ვხედავთ, ეს უკანასკნელი არ არის დამოკიდებული ელექტრონის ენერგიაზე. თავისუფალი განარბენი

$$l = v\tau = \tau \sqrt{\frac{2E}{m^*}} = \frac{3a^3}{2\pi} \left(\frac{M}{m^*} \right) \left(\frac{\hbar \omega_0}{z e^2} \right)^2 e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_0 T}} \cdot \sqrt{\frac{E}{k_0 T}}. \quad (8.126)$$

რადგანაც ამ მიახლოებაში τ ელექტრონის სიჩქარის ფუნქცია არ არის, ამიტომ

$$u_D = \frac{e}{m^*} \cdot \frac{\overline{v^2 \tau}}{\overline{v^2}} = \frac{e}{m^*} \tau$$

და

$$A = \frac{u_H}{u_D} = \frac{\overline{v^2 \tau^2} \cdot \overline{v^2}}{(\overline{v^2 \tau})^2} = 1. \quad (8.127)$$

ამრიგად, ჩვენ განვიხილეთ გაბნევის თითქმის ყველა შესაძლო შემთხვევა და აღმოჩნდა, რომ ხოლის მუდმივაში შემავალი კოეფიციენტი იცვლება მცირე ინტეგრალში $A = 1 \div 2$. სწორედ ამის გამო მოსალოდნელი შეცდომა ხოლის ეფექტის გაზომვის დროს მინიმალურია.

§ 9. აპრიმალური ზომის სიგრძისა და მინარეზთა მინარეზიკული ღონის განსაზღვრა ცდით

კრისტალის სრული გამტარებლობა უდრის ელექტრონულ და ხვრელურ გამტარებლობათა ჯამს

$$\sigma = e(nu_n + pu_p),$$

სადაც σ ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტი,

საკუთარი გამტარებლობის შემთხვევაში $n = p$, ამიტომ

$$\sigma = e(u_n N_c + u_p N_v) e^{-\frac{E_g}{k_0 T}} = \sigma_0 e^{-\frac{E_g}{k_0 T}}. \quad (8.128)$$

N_c და N_v ტემპერატურის სამი მეორეული ხარისხის პირდაპირპროპორციულია, თუ ელექტრონების გაბნევა ძირითადად წარმოებს მესერის სიბლუარ რხევებზე, მაშინ, თანახმად 58-ში მიღებული შედეგისა, $n \sim T^{-3/2}$, ზოგად ზეშეხვევაში $n \sim T^{-1}$, სადაც $n \sim 1 \div 2$. ამიტომ σ_0 ტემპერატურისაგან თითქმის დამოკიდებული არ არის, ყოველ შემთხვევაში σ_0 -ს დამოკიდებულება ტემპერატურისაგან შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ $e^{-E_g/k_0 T}$ -თან შედარებით.

თანახმად (7.128) დამოკიდებულებისა

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{E_g}{2k_0 T}.$$

თუ ორდინატთა ლერძზე გადავზომავთ $\ln \sigma$ -ს, ხოლო აბსცისთა ლერძზე $\frac{1}{T}$ -ს, მივიღებთ სწორ ხაზს (ნახ. 75), რომლის საკუთარი კოეფიციენტი

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{E_g}{2k_0}. \quad (8.129)$$

ეშირად, ნეპერის ლოგარიტმის ნაცვლად იღებენ ბრიგის ლოგარიტმს და აბსცისთა ლერძზე გადავზომავთ $\frac{1000}{T}$ -ს. მაშინ აკრძალული ზონის სიდიდეს ელექტრონვოლტებში გვაძლევს შემდეგი ფორმულა

$$E_g = 0,4 \cdot \operatorname{tg} \varphi.$$

სრულიად ანალოგიურად მიწარევთ არეში გამტარებლობა

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_d}{k_0 T}} \quad (8.130)$$

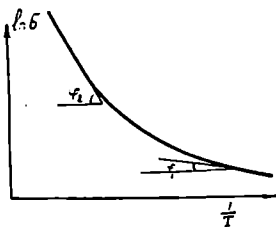
და

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{E_a}{k_0 T}}.$$

რადაც E_d და E_a არის დონორისა და აქცეპტორის ენერგეტიული დონე, სათანადოდ. $\ln \sigma - \frac{1}{T}$ გრაფიკზე (8.30) დამოკიდებულება გვაძლევს ისევე სწორ ხაზს, რომლის საკუთარ კოეფიციენტო

$$\operatorname{tg} \varphi_1 = \frac{E_a}{2k_0} \quad \text{და} \quad \operatorname{tg} \varphi_2 = \frac{E_g}{2k_0}. \quad (8.131)$$

ცდაზე ზომიერ ნიშნის ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტებს ტემპერატურის საკმარისად დიდ ინტერვალში, დაწყებული დაბლიდან მაღალ ტემპერატურამდე, რათა მოიცავდეს როგორც მინარევული, ისე საკუთარი გამ-



ნახ. 75.

ტარებლობის არეს. მიღებული $\ln \sigma \sim \frac{1}{T}$

მრუდის მაღალი ტემპერატურის შესაბამისი არე შეიძლება აპროქსირებული იქნეს სწორი ხაზით, რომლის საკუთხო კოეფიციენტი გვაძლევს აკრძალული ზონის სიგანეს, ხოლო მრუდის დაბალი ტემპერატურის შესაბამისი არე შეიძლება აგრე-

თვე აპროქსირებული იქნეს სწორი ხაზით, რომლის საკუთხო კოეფიციენტი გვაძლევს მინარევის სათანადო ენერგიის დონეს (E_a ან E_d -ს), როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 75-ზე.

ნახევარგამტარების ზოგიერთი ოპტიკური თვისება

ამ თავში განვიხილავთ ელექტრონულ გადასვლებს, რომელშიც მონაწილეობას ღებულობენ სინათლის კვანტები — ფოტონები და სითბური კვანტები — ფონონები. ნახევარგამტარებში ელექტრონული გადასვლები შესაძლებელია დაბალი ენერგეტიკული დონიდან მაღალზე, ანდა პირიქით — მაღალი ენერგეტიკული დონიდან დაბალზე. პირველ შემთხვევაში — გამო-სჩივებად ანდა არაგამოსჩივებად რეკომბინაციასთან. ნახევარგამტარებში შესაძლო ელექტრონული გადასვლების რიცხვი ძალზე დიდია, ამიტომ სათანადო სპექტრების (შთანთქმის ან გამოსჩივების) შესწავლა იძლევა საკმარისად ფართო ინფორმაციას ნახევარგამტარების ფიზიკური თვისე-ბების შესახებ.

შევირდებით მხოლოდ ზოგიერთ მნიშვნელოვან ოპტიკურ გადა-სვლებზე, ვინაიდან ყველა შესაძლო გადასვლის აქ განილვა შეუძლე-ბელია.

§ 1. შთანთქმა. შთანთქმის კოეფიციენტი

სინათლის კვანტების შთანთქმის შედეგად შესაძლებელია შემდეგი სა-ხის გადასვლები:

ა) სავალენტო ზონიდან გამტარებლობის ზონაში (საკუთარი შთან-თქმა), რისთვისაც აუცილებელია ფოტონის ენერგია იყოს მეტი ან ტოლი აკრძალული ზონის სიგანეზე $h\nu \geq E_g$.

ბ) მინარევის დონიდან გამტარებლობის ანდა სავალენტო ზონაში, რისთვისაც აუცილებელია ფოტონის ენერგია იყოს მეტი ან ტოლი მინა-რეველი ატომების იონიზაციის ენერგიაზე $h\nu \geq E_i$.

გ) ზონის შიგნით ერთი ენერგეტიკული დონიდან მეორეში, რისთ-ვისაც აუცილებელია აღებული ზონა მთლიანად არ იყოს შევსებული ელექტრონებით (შთანთქმა თავისუფალ მატარებლებზე).

დ) ზონის შიგნით ქვეზონებში (ასეთი ქვეზონები გვაქვს როგორც გამტარებლობის, ისე ვალენტურ ზონებში).

ე) ექსიტონების წარმოშობით (განხილული იქნება § 4-ში) და სხვა, მოცემული სიხშირის ფოტონების შთანთქმის კოეფიციენტი წარმოადგენს რიცხვს, რომელიც გვიჩვენებს, დაცემული ფოტონების ენერგიის რა ნაწილი შთანთქმდება კრისტალის მიერ ერთ სანტიმეტრ სიღრმეზე შეკრისას, ე. ი.

$$\alpha(h\nu) = \frac{1}{J(h\nu)} \frac{d}{dx} J(h\nu), \quad (9.1)$$

სადაც $J(h\nu)$ არის ν სიხშირის ფოტონების ინტენსივობა.

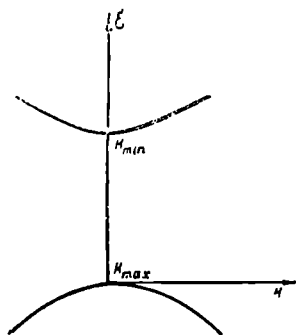
ვიწინადან ფოტონების შთანთქმა დაკავშირებულია ელექტრონის გადასვლასთან დაბალი ენერგეტიკული დონიდან მაღალზე, ამიტომ ბუნებრივია, რომ შთანთქმის კოეფიციენტი დამოკიდებული იქნება ერთი ენერგეტიკული დონიდან მეორეზე გადასვლის ალბათობაზე (p_{ij}), საწყისი და საბოლოო მდგომარეობათა სიმკვრივების (n_i და n_j) ნაშრავლისა, ამასთან, ეს ნაშრავლი უნდა იყოს აქამული ყველა შესაძლო გადასვლის მიმართ, რომლებსაც შეესაბამება $h\nu$ ენერგია, ე. ი.

$$\alpha(h\nu) = A \sum p_{ij} n_i n_j. \quad (9.2)$$

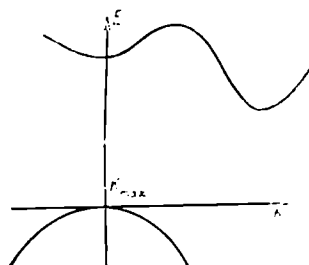
შემდეგში ჩვენ ვიგულისხმებთ, რომ ქვედა ენერგეტიკული დონე მთლიანად შევსებულია ელექტრონებით, ხოლო ზედა—მთლიანად ცარიელია. ცხადია, ასეთი დავება გამართლებულია ნახევარგამტარებისათვის $T=0^\circ\text{K}$ ტემპერატურაზე.

კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ ოპტიკური გადასვლები ემორჩილება „შერჩევის წესს“ ელექტრონის კვაზი-იმპულსისათვის, ანდა ტალღური ვექტორის აკრძალული ან დასაშვები მნიშვნელობისათვის. ამიტომ საჭიროა გავარჩიოთ ორი ტიპის ოპტიკური გადასვლები: 1) გადასვლები, რომელშიც მონაწილეობას ღებულობს მხოლოდ ერთი ფოტონი და 2) გადასვლები, რომელშიც მონაწილეობს გარდა ფოტონისა ფონონიც (ფონონების გამოსხივება ან შთანთქმა). პირველი ტიპის გადასვლებს უწოდებენ პირდაპირ გადასვლებს. მათთვის „შერჩევის წესს“ შეადგენს $\Delta k=0$, ხოლო მეორეს—არაპირდაპირ გადასვლებს, მათთვის „შერჩევის წესს“ შეადგენს $\Delta k \neq 0$. საჭიროა აგრეთვე გავარჩიოთ ორგვარი ნახევარგამტარები: პირველს მიეკუთვნებიან ის ნახევარგამტარები, სადაც გამტარებლობის ზონის ენერგიის მინიმუმი (ანდა ტალღური ვექტორის მინიმუმი k_{min}) და ვალენტური ზონის ენერგიის მაქსიმუმი (ანდა k_{max}) მდებარეობენ ბრილუენის ზონის ერთი და იგივე წერტილში, ე. ი. $k_{min}=k_{max}$ (ნახ. 76). მეორე ტიპის ნახევარგამტარებში $k_{min} \neq k_{max}$ (ნახ. 77). პირველ ტიპს მიეკუთვნებიან უმეტესი ნაწილი ნახევარგამტარებისა, მათ შორის Ge და Si, ხოლო მეორე ტიპს — A_3B_5 ნახევარგამტარები.

პირველი ტიპის ნახევარგამტარებში ოპტიკური გადასვლების თეორია საკუთარი შთანთქმის მაქსიმალურ შედარებით მარტივია, ამიტომ ამ უკანასკნელის განხილვით დავიწყებთ, ამასთან ვიგულისხმებთ, რომ აღვნიშნავთ, რომ აქვს ზონების გადაფარვას. სიმარტივისათვის კოორდინატთა სათავეს ავირჩევთ ისე, რომ $k_{min} = k_{max} = 0$.



ნახ. 76.



ნახ. 77.

§ 2. დასაშვები და აპრიმალური პირდაპირი გადასვლები

ა) დასაშვები პირდაპირი გადასვლები

აღვნიშნოთ ელექტრონის კვაზი-იმპულსი შთანთქმამდე p_1 -ით, ხოლო შთანთქმის შემდეგ p_2 -ით. დაცემული ფოტონის იმპულსი $p_p = \frac{\hbar}{\lambda} q_0$, სადა q_0 არის ერთეული ვექტორი, რომელიც განსაზღვრავს ფოტონის მიმართულებას. მაშინ კვაზი-იმპულსის შენახვის კანონის თანახმად,

$$p_1 - p_2 = \frac{\hbar}{\lambda} q_0. \quad (9.3)$$

ეს უკანასკნელი უშუალოდ მიიღება ამოცანის კვანტურ-მექანიკური განხილვიდან. მართლაც, თუ აღვნიშნავთ შეუფოთების ენერგიას F -ით, რომელსაც გვაძლევენ დაცემული სინათლის ტალღები—ელექტრომაგნიტური ტალღები, მაშინ ორ მდგომარეობათა შორის გადასვლის ალბათობა პირდაპირპროპორციულია M_{12} მატრიცული ელემენტებისა, სადაც

$$M_{12} = \int \psi_1^* F \psi_2 d\mathbf{r}. \quad (9.4)$$

ψ_2 არის ტალღური ფუნქცია—ბლოხის ფუნქცია ელექტრონის საწყისი, ხოლო ψ_1 —საბოლოო მდგომარეობისა, ამრიგად

$$F = A e^{-2\pi i(r q_0/\lambda)}$$

$$\psi_i = u_{ki}(r) e^{i(k_i r)} \quad (9.5)$$

$$\psi_j = u_{kj}(r) e^{i(k_j r)},$$

გადასვლის მატრიცული ელემენტისათვის მიიღება

$$M_{ij} = M_{12} = A \int u_{k_1}^*(r) u_{k_2}(r) e^{i(k_1 - k_2 - \frac{2\pi}{\lambda} q_0) r} dr.$$

ეს ინტეგრალი ნულის ტოლია, გარდა

$$k_1 - k_2 = \frac{h}{\lambda} q_0,$$

მაგრამ $p = \hbar k$, ამიტომ

$$p_1 - p_2 = \frac{\hbar}{\lambda} q_0,$$

ამრიგად მივიღეთ კვაზი-იმპულსის შენახვის კანონი. თუ ელექტრონის ენერგია $k_0 T$ რიგისაა, მაშინ ოთახის ტემპერატურაზე ელექტრონის ტალღის სიგრძე $\lambda_1 \sim 5 \cdot 10^{-7}$ სმ, ფოტონისათვის $\lambda \sim 10^{-4}$ სმ. თუ ფოტონის ენერგია მოთავსებულია ინფრაწითელ არეში, ამ შემთხვევაში

$$\frac{h}{\lambda} \gg \frac{h}{\lambda_1} \text{ ანდა } |p_1 - p_2| \gg p.$$

ამიტომ საკმარისი სიზუსტით შეგვიძლია დავწეროთ

$$p_1 = p_2.$$

მაშასადამე, ერთ-ერთ „დასაშვებ“ გადასვლებს ზონა-ზონაში წარმოადგენს ვერტიკალური გადასვლები (ნახ. 82-ზე ნაჩვენებია A გადასვლები) რომელიც ეთანადება შერჩევის წესს $\Delta k = 0$. ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში გადასული p_1 იმპულსის მქონე ელექტრონი ვალენტურ ზონაში აჩენს ხერვლს, რომელიც მოძრაობს p_1/m სიჩქარით (იმპულსის შენახვის გამო). სხეანაირად რომ ვთქვათ, ფოტონებით გენერირებული ელექტრონ-ხერელი უნდა მოძრაობდეს ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულებით. ამ შემთხვევაში მინიმალური სიხშირე სინათლის კვანტებისა, რომლებიც გვაძლევენ პირდაპირ (ვერტიკალურ) გადასვლებს, განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით

$$\nu_{min} = \frac{E_g}{h}. \quad (9.6)$$

ამ ფორმულით განისაზღვრება შთანთქმის საკუთარი ზოლის შესაბამისი სიხშირე.

ცხადია, აღნიშნული გადასვლების პარალელურად არსებობენ სხვა

გადასვლებიც, რომლებიც მეტად ან ნაკლებად ახდენენ გავლენას შთანთქმის მრუდის სახეზე. რომ განესაზღვროთ შთანთქმის კიდის მახლობლად მრუდის ფორმა, ამისათვის გამოვთვალოთ შთანთქმის კოეფიციენტი $\alpha(h\nu)$. ეს უკანასკნელი, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, წარმოადგენს ნამრავს გადასვლის ალბათობისა საწყისი და საბოლოო მდგომარეობათა სიმკვრივეზე. პირდაპირი გადასვლების შემთხვევაში გადასვლის ალბათობა p_{ij} არ არის დამოკიდებული დაცემული ფოტონის ენერგიაზე. ყოველ საწყის მდგომარეობას E_i ეთანადება საბოლოო მდგომარეობა E_j ისეთი, რომ

$$E_j = h\nu - |E_g|.$$

ფეექტური მასის მიახლოებაში ელექტრონის ენერგია კვადრატული ფუნქციად κ -ს როგორც საწყის, ისე საბოლოო მდგომარეობაში,

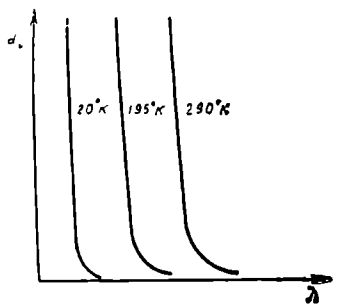
$$E_j - E_g = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_e^*} \quad \text{და} \quad E_i = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_p^*},$$

ამიტომ

$$h\nu - E_g = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_p^*} \right) = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_r},$$

სადაც $\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_p^*}$ არის ელექტრონისა და ხვრელის დაყვანილი ფეექტური მასა.

ვინაიდან პირდაპირი გადასვლების შემთხვევაში გადასვლის ალბათობა (p_{ij}) არ არის დამოკიდებული ფოტონის ენერგიაზე, ამიტომ შთანთქმის კოეფიციენტი დამოკიდებული იქნება მხოლოდ საწყისი მდგომარეობის სიმკვრივეზე, რომელიც მოიცემა შემდეგი ფორმულით:



ნახ. 78.

$$G(h\nu) d(h\nu) = \frac{(2m_r)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^2} (h\nu - E_g)^{1/2} d(h\nu).$$

$$\text{ამრიგად } \alpha(h\nu) = A(h\nu - E_g)^{1/2}, \text{ როდესაც } h\nu \geq E_g, \quad (9.7)$$

თანახმად (9.7) ფორმულისა, $\alpha \sim h\nu - E_g$ წარმოადგენს სწორ ხაზს, რომელიც მოცემულია ნახ. 78-ზე, სხვადასხვა ტემპერატურაზე ამ წრფეების ექსტრაპოლაცია ნულამდე ($\alpha=0$) გვაძლევს აკრძალული ზონის სიგანეს E_g -ს. რაც უფრო სუფთაა ნიმუში, მით უფრო ზუსტად განისაზღვრება შთანთქმის კიდე.

(9.7) ფორმულა სამართლიანია მაშინ, როდესაც არგუმენტი $h\nu - E_g$ მცირეა. დიდი არგუმენტის შემთხვევაში, ცდების თანახმად, შთანთქმის კოეფიციენტი ნაწერობას აღწევს. მაგალითად, როდესაც $h\nu - E_g$ ექსიტონის ბმის ენერგიის რიგისაა, მიიღება (9.7) ფორმულისაგან განსხვავებული შედეგი, სახელდობრ, როდესაც $h\nu - E_g \rightarrow 0$ შთანთქმა არ ქრება, არამედ მისწრაფვის რაღაც მუდმივი მნიშვნელობისაკენ.

ბ) აკრძალული პირდაპირი გადასვლები

ზოგიერთ ნივთიერებაში პირდაპირი გადასვლები, რომელიც ეთანადება $\Delta k = 0$, კვანტური შერჩევის წესის თანახმად აკრძალულია. ხოლო $k \neq 0$ შემთხვევაში გადასვლის ალბათობა პროპორციულია k^2 , ე. ი. $\sim (h\nu - E_g)$ -ს. ვინაიდან კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე $\sim (h\nu - E_g)^{1/2}$, ამიტომ შთანთქმის კოეფიციენტისათვის ელვებულობა

$$\alpha(h\nu) = A' (h\nu - E_g)^{3/2},$$

სადაც

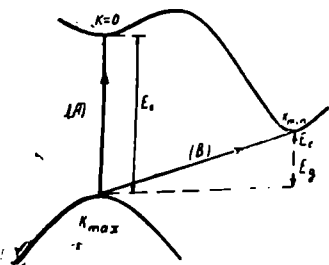
$$A' = \frac{\text{const}}{h\nu}.$$

(9.8)

§ 3. პირდაპირი და არაპირდაპირი გადასვლები

$k_{min} \neq k_{max}$ შემთხვევაში

როდესაც $k_{min} \neq k_{max}$ შესაძლებელია როგორც პირდაპირი (A), ისე არაპირდაპირი (B) გადასვლები (ნახ. 79). E_c არის ელექტრონის ენერგია გამტარებლობის ზონაში $k=0$ წერტილში. $E_c(0)$ არის გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირის შესაბამისი ენერგია k_{min} წერტილში. თანახმად



ნახ. 79.

ნახ. 79-სა $E_g < E_0$, ამიტომ პირდაპირი გადასვლების შემთხვევაში ფოტონს უნდა გააჩნდეს უფრო მეტი ენერგია, ვიდრე არაპირდაპირი გადასვლის შემთხვევაში. ვინაიდან ფოტონის ენერგია ბევრად ნაკლებია ელექტრონის ენერგიასთან შედარებით, ამიტომ არაპირდაპირი გადასვლების დროს $p_1 - p_2$ იმპულსი უნდა გასცეს ან მიიღოს მესერმა, ეს შესაძლებელია მოხდეს ორი გზით: მესერის მიერ ფონონის გა-

მოსხივების ან შთანთქმის გზით. ამ დროს მინიმალური სიხშირე, რომლის დროსაც შესაძლებელია გადასვლები, განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:

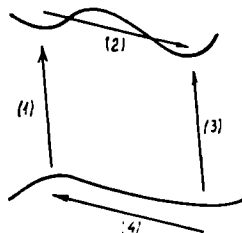
$$h\nu = E_g - E_p - \text{ფონონის შთანთქმა}$$

(9.9)

$$h\nu = E_g + E_p - \text{ფონონის გამოსხივება.}$$

სადაც E_p არის ფონონის ენერგია. ვინაიდან $E_p \ll E_g$, ამიტომ ფონონების შთანთქმა ან გამოსხივება გავლენას ახდენს შთანთქმის მრუდის სახეზე, მხოლოდ საკუთარი შთანთქმის არეში $h\nu \simeq E_g$. ფონონების შთანთქმისა და გამოსხივების გათვალისწინებით შთანთქმის კოეფიციენტი გამოთვლილ იქნა ბარდინის, ბლეტენისა და ხოლის მიერ. მათ გამოთვლებში შევიდა ელექტრონ-ფონონის ურთიერთქმედების კონსტანტა. კვანტურ-მექანიკური.

გათვლისას გადასვლის საბოლოო შედეგი წარმოდგენილია ორი ვირტუალური პროცესების ჯამის სახით. ამასთან, ვირტუალურ პროცესებში, ენერგიის შენახვას შეიძლება ადგილი არ ჰქონდეს. ენერგიის შენახვას ადგილი აქვს მხოლოდ საბოლოო შედეგში. ეს ვირტუალური პროცესები წარმოდგენილია შემდეგი სახით: ფოტონის მოქმედებით ელექტრონი თავისი ტალღური ვექტორის უმნიშვნელო ცვლილებებით გადადის გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე (ნახ. 80), რომელსაც ეთანადება გადასვლა (1). ამ დროს ვალენტურ ზონაში ჩნდება ხერელი იგივე ტალღური ვექტორისა. რადგანაც ამ დროს ელექტრონს გააჩნია უფრო მეტი ენერგია, ვიდრე გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე მდებარე ელექტრონს, ამიტომ ეს ელექტრონი ფონონის გამოსხივებით გადადის გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე, სადაც ზას ეთანადება ტალღური ვექტორი k_{min} (გადასვლა (2)). იგივე შედეგი შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით: ფოტონის მოქმედებით ვალენტურ ზონაში უფრო ღრმად მდებარე ელექტრონი გადადის გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე (ხაზი 3), შემდეგ ვალენტური ზონის შიგნით გაჩენილი ხერელი გადადის უფრო დაბალ ენერგეტიკულ დონეზე (ხაზი 4)—ფონონის გამოსხივებით. აღნიშნული ვირტუალური პროცესების გათვალისწინებით შთანთქმის კოეფიციენტის გამოთვლა შედარებით რთულია, ამიტომ მოვიყვანთ მხოლოდ საბოლოო შედეგს ფონონის შთანთქმის შემთხვევაში



ნახ. 80.

ლო ცვლილებებით გადადის გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე (ნახ. 80), რომელსაც ეთანადება გადასვლა (1). ამ დროს ვალენტურ ზონაში ჩნდება ხერელი იგივე ტალღური ვექტორისა. რადგანაც ამ დროს ელექტრონს გააჩნია უფრო მეტი ენერგია, ვიდრე გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე მდებარე ელექტრონს, ამიტომ ეს ელექტრონი ფონონის გამოსხივებით გადადის გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე, სადაც ზას ეთანადება ტალღური ვექტორი k_{min} (გადასვლა (2)). იგივე შედეგი შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით: ფოტონის მოქმედებით ვალენტურ ზონაში უფრო ღრმად მდებარე ელექტრონი გადადის გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე (ხაზი 3), შემდეგ ვალენტური ზონის შიგნით გაჩენილი ხერელი გადადის უფრო დაბალ ენერგეტიკულ დონეზე (ხაზი 4)—ფონონის გამოსხივებით. აღნიშნული ვირტუალური პროცესების გათვალისწინებით შთანთქმის კოეფიციენტის გამოთვლა შედარებით რთულია, ამიტომ მოვიყვანთ მხოლოდ საბოლოო შედეგს ფონონის შთანთქმის შემთხვევაში

$$\alpha_a(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g + E_p)^2}{e^{E_p/k_0T} - 1} \quad (9.10)$$

და ფონონის გამოსხივების შემთხვევაში

$$\alpha_e(h\nu) = \frac{A(h\nu - E_g - E_p)^2}{1 - e^{E_p/k_0T}} \quad (9.11)$$

E_p —ფონონის ენერგია.

რადგანაც $h\nu > E_g + E_p$ შემთხვევაში შესაძლებელია ფონონების რო-
გორც შთანთქმა, ისე გამოსხივება, ამიტომ

$$\alpha(h\nu) = \alpha_a(h\nu) + \alpha_c(h\nu), \quad (9.12)$$

ძალიან დაბალ ტემპერატურაზე ფონონების სიმკვრივე ძალიან მცირეა, ამიტომ $\alpha_a(h\nu)$ იქნება მცირე. ნახ. 81-ზე ნაჩვენებია α_a და α_c -ს დამოკიდებულება ტემპერატურისაგან. ამ მრუდების ექსტრაპოლაცია აბსცისათა ღერძის გადაკვეთამდე იძლევა $E_g - E_p$ და $E_g + E_p$ -ს მნიშვნელობებს. α_a და α_c მრუდები გადაწეულია ერთიმეორის მიმართ გარკვეული მანძილით, რაც იმის მაჩვენებელია, რომ აკრძალული ზონის სიგანე ტემპერატურის ფუნქციაა. ძლიერად ლეგირებულ მასალაში ფერმის დონე E_F მოთავსებულია გამტარებლობის ზონაში. მეორე მხრივ, ჩვენ ვიცით, რომ E_F დონის ქვემოთ ყველა დონე დაკავებულია ელექტრონებით. ამიტომ საკუთარი შთანთქმა, რომელიც დაკავშირებულია E_F -ს ქვედა დონეებზე გადასვლასთან, შეუძლებელია. ეს გარემოება გვაძლევს შთანთქმის კიდის გადაწევას დიდი ენერგიის მხარეზე, დაახლოებით E_F სიდიდეზე. შთანთქმის კიდის ამ გადაწევის ხშირად უწოდებენ ბურშტეინ-მოსის გადაწევას. მართლაც, ცდაზე დამზერილ იქნა ძლიერად ლეგირებულ Ge-ის მასალაში შთანთქმის კიდის გადაწევა E_F სიდიდეზე. ძლიერად ლეგირებულ მასალაში არაპირდაპირი გადასვლების დროს შესაძლებელია მოხდეს გაბნევა ელექტრონ-ხვრელზე ანდა მინარევებზე, რაც უზრუნველყოფს იმპულსის შენარჩუნებას. ამიტომ ასეთ შემთხვევაში ფონონების მონაწილეობა სავალდებულო არ არის. შთანთქმის კოეფიციენტისათვის მიიღება შემდეგი ფორმულა

$$\alpha(h\nu) = A \cdot N(h\nu - E_g - E_p)^2, \quad (9.13)$$

სადაც N არის გამბნევი ცენტრების კონცენტრაცია.

არაპირდაპირი გადასვლები შესაძლებელია აგრეთვე $k_{min} = k_{max} = 0$ შემთხვევაშიაც. ამ დროს იმპულსის შენახვა ხდება ფონონების ემისიის ან შთანთქმის შედეგად, ანდა ელექტრონების გაბნევის შედეგად ელექტრონებზე ან მინარევებზე. აქ შესაძლებელია გადასვლები ვალენტური ზონის ნებისმიერი დონიდან გამტარებლობის ზონის ნებისმიერ დონეზე. ნებისმიერ შემთხვევაში α შთანთქმის კიდის მაქსიმალად მოცემულია (9.13) კანონის მიხედვით. ასეთი არაპირდაპირი გადასვლების აღბათობა $k_{min} = k_{max} = 0$ შემთხვევაში ბევრად ნაკლებია პირდაპირი გადასვლების აღბათობასთან შედარებით.

§ 4. მ ძ ხ ი ტ ო ნ ი

როდესაც კრისტალს ეცემა სინათლის კვანტები—ფოტონები, რომელთა ენერგია მეტია ან ტოლია აკრძალული ზონის სიგანეზე ($h\nu \geq E_g$), მოხდება სინათლის შთანთქმა, რის შედეგადაც წარმოიშობა ელექტრონ-

ხერელი. ასეთი წყვილების წარმოშობის შედეგად გაიზრდება კრისტალის ელექტროგამტარებლობა. ცდაზე დამზერილ იქნა აგრეთვე ისეთი შემთხვევებიც, როდესაც ადგილი აქვს სინათლის შთანთქმას, მაგრამ გამტარებლობა არ იცვლება. ამ მოვლენის ახსნა პირველად ფრენკელმა მოგვცა. მისი აზრით, სინათლის კვანტებს, რომელთა ენერგია ცოტათი ნაკლებია აკრძალული ზონის სიგანეზე, ელექტრონ-ხერელების წარმოშობა არ შეუძლიათ. ამ დროს კრისტალის რეგულარული ტომები აღგზნებულ მდგომარეობაში გადადიან. ამ მდგომარეობაში გადაყვანილი ატომი თითქმის მყისვე უბრუნდება თავის ნორმალურ მდგომარეობას აღგზნების დროს მიღებული ენერგიის გამოყოფით, რომელიც გადაეცემა მეზობელ ატომს და ა. შ. ატომის აღგზნებული მდგომარეობა გავრცელდება კრისტალში აღგზნების ტალღის სახით ანდა კვაზი-ნაწილაკის სახით, რომელსაც ფრენკელმა ექსიტონი უწოდა. შემდეგში ფრენკელის ეს იდეა განზოგადებულ იქნა სხვა მკვლევარების მიერ. ასე მაგალითად, მოტი-ვანიეს მიხედვით, გამტარებლობის ზონის ყოველი ელექტრონი ვალენტური ზონის ხერელთან კულონური ველით შეიძლება იმყოფებოდეს ბმულ მდგომარეობაში. ასეთ წყვილს მოტი-ვანიეს ექსიტონს უწოდებენ.

ექსიტონური სპექტრი შეიძლება დადგენილი იქნეს ზონური თეორიის ფარგლებში ეფექტური მასის მიახლოებაში. მართლაც, თუ ელექტრონ-ხერელის ურთიერთქმედების კულონურ ენერგიას წარმოვიდგენთ

$$U = \frac{e^2}{\kappa (r_n - r_p)} \quad (9.14)$$

სახით, სადაც r_n და r_p არის ელექტრონისა და ხერელის რადიუსვექტორები სათანადოდ, მაშინ ეფექტური მასის მიახლოებაში შრედინგერის განტოლებას ექნება შემდეგი სახე (იხ. თავი IV, § 11)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_n} \Delta_n - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p - \frac{e^2}{\kappa (r_n - r_p)} \right) \psi(r_n, r_p) = \epsilon \psi(r_n, r_p), \quad (9.15)$$

სადაც m_n და m_p არის ეფექტური მასა ელექტრონისა და ხერელისა, Δ_n და Δ_p — ლაპლასის ოპერატორები ელექტრონისა და ხერელის კოორდინატებში, სათანადოდ.

შემოვიტანოთ ფარდობითი და მასების ცენტრის კოორდინატები

$$R = \frac{m_n r_n + m_p r_p}{m_n + m_p}, \quad (9.16)$$

$$\rho = r_n - r_p.$$

ამ კოორდინატებში (2.15) განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_\rho - \frac{e^2}{\kappa \rho} \right) \psi(R, \rho) = \epsilon \psi(R, \rho), \quad (9.17)$$

სადაც

$$M = m_n + m_p \quad \text{და} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_n} + \frac{1}{m_p}.$$

μ არის ელექტრონისა და ხერელის დაყვანილი მასა, Δ_R და Δ_p ლაპლასის ოპერატორების R და p კოორდინატებში. (9.17) განტოლების ამოხსნა ვეძიოთ შემდეგი სახით:

$$\psi(Rp) = \chi(R) \varphi(p). \quad (9.18)$$

ამ უკანასკნელის ჩასმა (9.17) განტოლებაში გვაძლევს:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \frac{1}{\chi(R)} \Delta_R \chi(R) - \frac{1}{\varphi(p)} \left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_p \varphi(p) + \frac{e^2}{\kappa p} \varphi(p) \right] = E. \quad (9.19)$$

აქედან მიიღება ორი ტოლობა:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R \chi(R) = w \chi(R) \quad (9.20)$$

და

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_p \varphi(p) - \frac{e^2}{\kappa p} \varphi(p) = E' \varphi(p), \quad (9.21)$$

სადაც

$$w + E' = E.$$

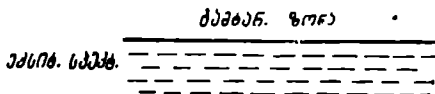
პირველი განტოლება აგვიწერს მასების ცენტრის ტრანსლაციურ მოძრაობას w ენერგიით, $M = m_n + m_p$ მასით და $\frac{\sqrt{2Mw}}{\hbar}$ ტალღური ვექტორით, მეორე განტოლება — ელექტრონ-ხერელის ფარდობით მოძრაობას μ დაყვანილი მასით. ეს განტოლება ანალოგიურია შრედინგერის განტოლებისა წყალბადის ატომისათვის, ამიტომ ენერგიის სპექტრისათვის (9.21) განტოლება გვაძლევს ანალოგიურ ფორმულას

$$E_n = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \kappa^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (9.22)$$

ამრიგად, ექსიტონის ენერგეტიკული სპექტრი აღგენს ბალმერის სერიას, რომელიც იმყოფება აკრძალულ ზონაში (რაც ნიშნავს ელექტრონის ბმულ მდგომარეობას), გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირის მახლობლად (ნახ. 81), რომელიც $n = \infty$ შემთხვევაში ემთხვევა გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირს.

სინათლის კვანტების მოქმედებით შესაძლებელია გადასვლები ძირითადი დონიდან ექსიტონის დისკრეტულ დონეებზე. გადასვლები შესაძლებელია როგორც პირდაპირი, ისე არაპირდაპირი. ნახევარგამტარებში, სადაც აკრძალული არ არის პირდაპირი გადასვლები, თავისუფალი ექსიტონი წარმოიშობა ფოტონის შთანთქმის შედეგად, თუ $\hbar\nu = E_p - E_x$, სადაც E_x არის ელექტრონის ბმის ენერგია. $k=0$ წერტილზე მიიღება

მკაფიო პიკი, რომელიც ტემპერატურის გადიდებით განიერდება. დიდი ენერგიის ფოტონებს $h\nu > E_g - E_x$ შეუძლიათ წარმოქმნან ექსიტონები გარკვეული კინეტიკური ენერგიით, რომლებსაც შეუძლიათ სათანადო წვლილი შეიტანონ ზონა-ზონა გადასვლების შესაბამ შთანთქმის სპექტრში.



პლან. ზონა

ნახ. 81.

შთანთქმის კოეფიციენტის გადიდება შემჩნეულია აგრეთვე იმ შემთხვევაში, როდესაც გადასვლები ხდება ფონონის მონაწილეობით:

$$h\nu = E_g - E_p - E_x \text{ ფონონის შთანთქმისას.}$$

და

(9.23)

$$h\nu = E_g + E_p - E_x \text{ ფონონის გამოსხივებისას}$$

შესაძლებელია აგრეთვე გადასვლები რამდენიმე ფონონის მონაწილეობით.

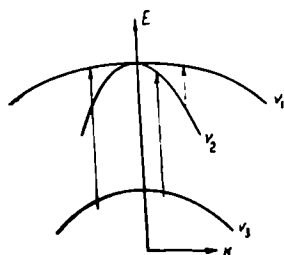
ექსიტონები შეიძლება წარმოიშვას აგრეთვე ნახევარგამტარებში, სადაც ადგილი აქვს მხოლოდ არაპირდაპირ გადასვლებს. ამის შესაბამისად შემოგვაქვს ტერმინი პირდაპირი და არაპირდაპირი ექსიტონებისა. სუფთა მასალებში ძალიან დაბალ ტემპერატურაზე მცირე რაოდენობით შექცეული მინარევები თითქმის ნეიტრალური არიან. შედარებით მცირე ველში (5—30 ვ/სმ) ხდება მათი იონიზაცია. მინარევების იონიზაციასთან დაკავშირებულია ორი ეფექტი: 1) იონიზირებული მინარევები ქმნიან კულონურ ველს და ამით ამახინჯებენ ზონის სურათს, 2) წარმოშობილი თავისუფალი ელექტრონები ეკრანირებას ახდენენ თავისი კულონური ველით ელექტრონ-ხერელის (ექსიტონის) ურთიერთქმედების. ამრიგად, მცირდება ექსიტონის წარმოშობის ალბათობა, რის შედეგადაც შეიძლება შემცირდეს ანდა მთლიანად გაქრეს ექსიტონური პიკები, ცდაზე ასეთი შემთხვევებიც იქნა დაშვებული.

§ 5. სხვა ტიპის გადასვლები

ა) ზონის შიგნით გადასვლები

პირდაპირი გადასვლები ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში შესაძლებელია ნებისმიერ წერტილში კვაზი-იმპულსის სივრცეში, გარდა იმ შემთხვევისა, როდესაც გადასვლები აკრძალულია „შერჩევის წესის“ გამო. ყველა ასეთ გადასვლაში ფოტონის ენერგია მეტია, ვიდრე

აკრძალული ზონის სიგანე. გარდა ამისა, გამტარებლობის ზონაში ხშირად გვაქვს ქვეზონებიც, ამიტომ დიდი ენერგიის ფოტონებს შეუძლიათ გამოიწვიონ გადასვლები ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონის ქვეზონებში. შესაძლებელია აგრეთვე ასეთივე გადასვლები გამტარებლობის ზონის ქვეზონებში გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდიდან, ანდა მინარევის დონეებიდან და სხვა. მთელ რიგ ნახევარგამტარებში, მაგ. IV ჯგუფისა და $A_{3\beta}$ ნაერთებში ვალენტური ზონა სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო იხლიჩება რამდენიმე ზონად (V_1, V_2, V_3) (ნახ. 82). ამიტომ შესაძლებელია ამ ქვედონეებიდან გადასვლები გამტარებლობის ზონაში $h\nu > E_g$ ფოტონების მოქმედებით, აგრეთვე გადასვლები ვალენტური ზონის ქვეზონებს შორის. $CaAs$ -ს შემთხვევაში ასეთი გადასვლებისათვის მიღებულია



ნახ. 82.

$V_3 \rightarrow V_1$	0,42 eV
$V_3 \rightarrow V_2$	0,31 eV
$V_2 \rightarrow V_1$	0,15 eV

ანალოგიური შედეგები დამზერილ იქნა აგრეთვე Ge -თვის. ცხადია, ასეთი გადასვლების დამზერა შესაძლებელია იმ შემთხვევაში, როდესაც აკრძალული ზონის სიგანე მცირეა, ვიდრე ქვეზონებს შორის მანძილი. საჭიროა აღინიშნოს, რომ შერჩევის წესის თანახმად, გადასვლის ალბათობა ვალენტური ზონის ქვეზონებს შორის პროპორციულია k^2 -ის. ეს წარმოადგენს პირდაპირი აკრძალული გადასვლების მაგალითს.

ბ) შთანთქმა თავისუფალ მატარებლებზე

ფოტონების შთანთქმა შესაძლებელია აგრეთვე დენის თავისუფალ მატარებლებზე. ამ დროს ელექტრონი ზონის შიგნით გადადის ერთი ენერგეტიკული დონიდან უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეზე. სათანადო შთანთქმა მონოტონური ცვლილებით ხასიათდება პიკების გარეშე. შთანთქმის კოეფიციენტი $\alpha \sim \lambda^r$, სადაც $r = 1,5 + 3,5$. ასეთი გადასვლების დროს ტალღური ვექტორი იცვლება, ამიტომ იმპულსის შენახვის კანონი მოითხოვს, რომ ადგილი ჰქონდეს ფონონების შთანთქმას ანდა იონიზირებულ მინარევებზე გაბნევას. კლასიკური თეორიის მიხედვით თავისუფალ მატარებლებზე შთანთქმის კოეფიციენტი

$$\alpha = \frac{Ne^2\lambda^2}{m \cdot 3\pi^2 n c^2 \tau}, \quad (9.24)$$

სადაც N —დენის მატარებელთა კონცენტრაციაა, n - გარდატეხის მაჩვენებელი, m^* —ეფექტური მასა და τ —რელაქსაციის დრო. ეს ფორმულა შეიძლება გამოყენებულ იქნას τ -ს ანდა m^* განსასაზღვრავად.

გ) მესერული შთანთქმა

ნახევარგამტარები, რომლებიც შედგებიან ორი ტიპის ატომებისაგან, შეიძლება განვიხილოთ როგორც სისტემა ელექტრული დიპოლებისა. ამ დიპოლებს შეუძლია ელექტრომაგნიტური ველის ენერგიის შთანთქმა. შთანთქმა მაქსიმალური ხდება, როდესაც გამოსხივების სიხშირე გაუტოლდება დიპოლის საკუთარ სიხშირეს, რომელიც იმყოფება შორეულ ინფრაწითელ არეში. მესერის რხევა შედგება აკუსტიკური და ოპტიკური რხეებისაგან. ნახევარგამტარებში გვაქვს ორი განივი ოპტიკური (T^o), ორი განივი აკუსტიკური (TA), ერთი სიგრძივი ოპტიკური (LO) და ერთი სიგრძივი აკუსტიკური (LA) შტოები. რადგან ოპტიკური გადასვლების დროს იმპულსის შენახვის კანონი მოითხოვს ფონონების შთანთქმას ან გამოსხივებას, მიიღება მრავალი სხვადასხვა სახის გადასვლა, ზემოაღნიშნულ შტოებში (თუმცა ზოგიერთი გადასვლა შერჩევის წესის თანახმად აკრძალულია), რის შედეგადაც გვექნება ძალზე რთული სტრუქტურები. გომეოპოლარულ კრისტალებში დიპოლები არ გვაქვს, მაგრამ მიუხედავად ამისა, ცდაზე დამზერილია მესერული შთანთქმები. ეს გარემოება დაკავშირებულია იმასთან, რომ გამოსხივება აწარმოებს ცალკეულ ატომებში დიპოლების ინდუცირებას. ეს უკანასკნელი კი, თავის მხრივ, ძლიერად მოქმედებს გამოსხივებასთან, რის შედეგადაც წარმოიშობიან ფონონები.

დ) შთანთქმა ცხელი ელექტრონების მონაწილეობით

არაპირდაპირი გადასვლების დროს, როგორც დავინახეთ, შესაძლებელია ფოტონების შთანთქმა უფრო ნაკლები ენერგიისა, ვიდრე E_g . ამ შემთხვევაში ენერგიის დეფიციტის შევსება ხდება ფონონების შთანთქმის შედეგად. ენერგიის ამ დეფიციტის შევსება შესაძლებელია აგრეთვე თავისუფალი ელექტრონებისაგან. განვიხილოთ პირდაპირი გადასვლები. ფოტონი, რომლის ენერგია $h\nu = E_g - \Delta E$, არ უნდა შთაინთქას. მაგრამ ენერგიის ΔE -ს მიღება შეიძლება თავისუფალი მატარებლებისაგან შემდგომი გზით. გარეშე ველში ხდება ელექტრონების გაცხელება (ტემპერატურის გადიდებით ან ველის მოქმედებით), რომელსაც შეუძლია გამოასხივოს გარკვეული ენერგიის ფოტონი, რომელიც ენერგიის ზემოაღნიშნულ დეფიციტს შეავსებს. ასეთი პროცესი შეადგენს სამი სხეულის პრობლემას, სადაც მონაწილეობს ორი ელექტრონი და ფონონი. ერთ-ერთი ელექტრონი (გაცხელებული) თავის ჭარბ ენერგიას გადასცემს მეორე ელექტრონს დაჯახების შედეგად, რომლის დროსაც ხდება გადაცემა ფონონებისა. ეს პროცესი ეკვივალენტურია ოქე-ფეფექტისა ფონონის მონაწილეობით. ცხადია,

ეს ელექტრონი უნდა იყოს საკმარისად გაცხელებული. რათა მეორე ელექტრონზე გადაცემული ენერგია საკმარისი იყოს ენერგიის დეფიციტის შევსებისათვის.

§ 6. გამოსხივებადი გადასვლები

გამოსხივება შეადგენს შთანთქმის შებრუნებულ პროცესს. ელექტრონი მაღალი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან დაბალზე გადასვლის დროს ათავისუფლებს ჰარბ ენერგიას, რომელიც გადაეცემა სხვა ობიექტებს, კერძოდ მესერს, ანდა გამოსხივდება სინათლის კვანტის სახით. შესაბამისად ამისა, გვაქვს გამოსხივებადი ანდა არაგამოსხივებადი გადასვლები. ზოგიერთ მასალაში, მაგ. InSb, გვაქვს ძირითადად გამოსხივებადი გადასვლები, რომელიც დაკავშირებულია ამ მასალის ზონურ სურათთან. ამ პარაგრაფში მოკლედ შევჩერდებით გამოსხივებად გადასვლებზე. გამოსხივების სიჩქარე ტოლია ელექტრონების საწყის და საბოლოო მდგომარეობათა სიმკვრივების (n_i და n_f) და გადასვლის ალბათობის ნამრავლისა

$$R = \mu_{if} n_i n_f \quad (9.25)$$

ეს ფორმულა სავსებით ანალოგიურია შთანთქმის ფორმულისა (9.2). შთანთქმის პროცესში გამოყენებულია ყველა მდგომარეობა, რომლებიც მდებარეობენ ფერმის დინის ორივე მხარეზე. ამის შედეგად მიიღება განიერი სპექტრი. გამოსხივება კი ხდება მდგომარეობის ვიწრო არეში, რის გამოც გამოსხივების სპექტრის სიგანე შედარებით ვიწროა. გამოსხივების მთავარ პირობას შეადგენს ის, რომ სისტემა არ იმყოფებოდეს წონასწორობის მდგომარეობაში. წონასწორობის მდგომარეობიდან გამოყვანა შესაძლებელია სხვადასხვა სახის ალგზნების გამოყენებით. სინათლის გამოსხივების პროცესს უწოდებენ ლუმინესცენციას. ალგზნება ელექტრული დენით (ინექცია ან გარღვევა) გვაძლევს ელექტროლუმინესცენციას, ოპტიკური ალგზნება — ფოტოლუმინესცენციას, ელექტრონის ნაკადით ალგზნება — კათოდოლუმინესცენციას. დაბალ ტემპერატურაზე დენის მატარებლები გაყინულია ჩამჭერებზე, საიდანაც ხდება მათი განთავისუფლება სითბური მოქმედებით — თერმოლუმინესცენციით, მექანიკური ალგზნება გვაძლევს ტრიბოლუმინესცენციას. ფლუორესცენცია არის იგივე ლუმინესცენცია, რომელიც მიმდინარეობს მხოლოდ ალგზნების მომენტში. ფოსფორესცენცია კი არის ლუმინესცენცია, რომელიც გრძელდება ალგზნების მოხსნის შემდეგ გარკვეული დროის განმავლობაში.

ვან რუსბრეკ-შოკლის თანაფარდობა

ალენიშნოთ სიხშირის ν და $\nu + d\nu$ ინტერვალში ელექტრონ-ხვრელის გენერაციის სიხშირე $R(\nu)d\nu$ -ით, ხოლო სიხშირის ამავე ინტერვალში გამოსხივებადი რეკომბინაციის სიჩქარე $P(\nu)p(\nu)d\nu$ -თ, სადაც $p(\nu)d\nu$ არის $d\nu$ ინტერვალში ფოტონების სიმკვრივე და $p(\nu)$ ფოტონის შთანთქმის

ალბათობა ერთეულ დროში. წონასწორობის დროს ეს ორი პროცესი ერთმანეთს აკომპენსირებენ, ე. ი.

$$R(\nu)d\nu = P(\nu) \rho(\nu)d\nu.$$

პლანკის ფორმულის თანახმად

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi^2\nu^2 n^2}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_0 T}} - 1}.$$

რეკომბინაციის ალბათობა $P(\nu)$ ნახევარგამტარში წარმოადგენს სიცოცხლის ხანგრძლივობის შებრუნებულ სიდიდეს

$$P(\nu) = \frac{1}{\tau(\nu)}.$$

მეორე მხრით

$$\frac{1}{\alpha(\nu)} = \nu\tau = \frac{c}{n}\tau,$$

ანდა

$$\tau(\nu) = \frac{1}{\alpha\nu} = \frac{n}{c\alpha}.$$

ამრიგად

$$P(\nu)d\nu = \frac{4\pi\nu^2 n^2}{c^2} \cdot \frac{\alpha(\nu)d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_0 T}} - 1}. \quad (9.26)$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს ფუნდამენტურ ფორმულას, რომელიც გვაძლევს კავშირს შთანთქმისა და გამოსხივების სპექტრებს შორის.

გამოსხივების სიჩქარე შეიძლება დაეუკავშიროთ ინსტინქციის კოეფიციენტს $k(\nu)$ -ს. რადგანაც

$$\alpha(\nu) = \frac{4\pi\nu}{c} k(\nu),$$

ამიტომ

$$R(\nu)d\nu = \frac{32\pi^2 k(\nu)n^2\nu^2 d\nu}{c^3 \left(e^{\frac{h\nu}{k_0 T}} - 1 \right)}.$$

თუ აღვნიშნავთ

$$u = \frac{h\nu}{k_0 T} = \frac{h}{k_0 T} \frac{c\alpha(\nu)}{4\pi k(\nu)},$$

მაშინ

$$R = \frac{8\pi n^2 (k_0 T)^2}{c^3 h^3} \int_0^\infty \frac{\alpha u^2 du}{e^u - 1},$$

ანდა

$$R(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \left(\frac{k_0 T}{h} \right)^3 n^2 \frac{\alpha(\nu) u^2 du}{e^u - 1}. \quad (9.27)$$

(9.26) და (9.27) თანაფარდობა გვაძლევს ფუნდამენტურ კავშირს რეკომბინაციის სიჩქარესა და შთანთქმის კოეფიციენტს შორის. თუ გვეცოდინება შთანთქმის სპექტრი, ამ თანაფარდობის მიხედვით შეგვიძლია დავადგინოთ გამოსხივებადი რეკომბინაციის სათანადო სპექტრი. წინა პარაგრაფში განვიხილეთ გადასვლები, რომლებიც დაკავშირებული იყო შთანთქმასთან, ცინაიდან გამოსხივება არის შთანთქმის შებრუნებული პროცესი, ამიტომ შესაძლებელია გამოსხივებადი გადასვლები: გამტარებლობის ზონა ვალენტურ ზონაში, გამტარებლობის ზონა მინარევის დონეებზე, ექსიტონური რეკომბინაცია და სხვა. აქაც შესაძლებელია ადგილი ექნეს როგორც პირდაპირ, ისე არაპირდაპირ გადასვლებს. მაგალითად, პირდაპირი გადასვლების შემთხვევაში გამოსხივების სპექტრი მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$L(\nu) = B(h\nu - E_g)^{1/2}, \quad (9.28)$$

სადაც

$$B = \frac{2e^2 (m_r)^{3/2}}{ncl^2 m_e^*},$$

m_r —დაყვანილი მასაა. რომელიც სავსებით ანალოგიურია (9.7) ფორმულისა.

არაპირდაპირი გადასვლების შემთხვევაში იმპულსის შენახვისათვის აუცილებელია ფონონის მონაწილეობა, ამიტომ გამოსხივების სპექტრისათვის მიიღება (9.10)-ის ანალოგიური ფორმულა

$$L(\nu) = B'(h\nu - E_g + E_p)^2. \quad (9.29)$$

როგორც ვიცით, ექსიტონს გააჩნია მრავალი აღგზნებული მდგომარეობა, ამიტომ შესაძლებელია გამოსხივებადი რეკომბინაცია ექსიტონის დისკრეტულ მდგომარეობაში გადასვლის შესაბამისად. ელექტრონ-ხვრელის რეკომბინაცია შეიძლება იქნეს არაგამოსხივებადი. თითქმის ყველა ნახევარგამტარში არაგამოსხივებადი რეკომბინაცია წარმოადგენს ძირითად პროცესს. მაგალითად, Ge-ში გამოსხივებადი რეკომბინაციის ალბათობა ათასჯერ ნაკლებია არაგამოსხივებადი რეკომბინაციის ალბათობაზე. არაგამოსხივებადი რეკომბინაციის სურათი სავსებით ნათელი არ არის, გამოყოფილი ენერგია შეიძლება მოხმარდეს მრავალ სხვადასხვა სახის პროცესებს. მაგალითად, რეკომბინაციის დროს გამოყოფილი ენერგია შეიძლება გადაეცეს მეორე თავისუფალ ელექტრონს, რომელიც ამის შედეგად გადავაუფრო მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში და გარკვეული დროის შემდეგ ჰქარბ ენერგიას კარგავს ფოტონების გამოსხივების სახით. ეს ეფექტი ცნობილია ოჟე-ფეექტის სახელწოდებით. არაგამოსხივებადი რეკომბინაციის დროს გამოყოფილი ენერგია შეიძლება დაიხაჯოს ფონონების კასკადის შესაქმნელად. კრისტალის თავისუფალ ზედაპირზე ყოველთვის გვაქვს დეფექტების გარკვეული რაოდენობა, რომლებიც ქმნიან როგორც ღრმა ისე

არაღრმა ლოკალურ დონეებს და წარმოდგენენ რეკომბინაციის ცენტრებს. როგორც წესი, ასეთ ცენტრებზე რეკომბინაცია მიმდინარეობს არაგამოსხივებადი გზით.

§ 7. იძულებითი გადასვლები

გადასვლები ორგვარია: სპონტანური (თავისთავადი) და იძულებითი. მოვინახოთ მათ შორის კავშირი.

როდესაც ნახევარგამტარს ეცემა $h\nu$ ენერგიის ფოტონები, ისინი გველევნ გადასვლებს E_1 და E_2 დონეებს შორის. თუ $h\nu_{12} = E_2 - E_1$, შესაძლებელია გადასვლები როგორც $1 \rightarrow 2$, ისე $2 \rightarrow 1$ მდგომარეობებში. თუ $E_2 > E_1$, მაშინ $1 \rightarrow 2$ გადასვლებს ეთანადება შთანთქმა, ხოლო შებრუნებულ გადასვლებს $2 \rightarrow 1$ — რეკომბინაციული პროცესი. თუ რეკომბინაცია გამოწვეულია გამსვლელი ფოტონებით, მაშინ სათანადო გადასვლები არის „იძულებითი“. თუ ეს გადასვლა ხდება თავისთავად, გარეშე ძალების არარსებობის შემთხვევაში, მაშინ — სპონტანურია.

T ტემპერატურაზე ფოტონების სიმკვრივე მოცემულია პლანკის ფორმულით

$$\rho(h\nu) = \frac{8\pi h^2 \nu^2}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_0 T}} - 1}.$$

გენერაციის სიჩქარე

$$G_{12} = A_{12} N_1 f_1 N_2 (1 - f_2) \rho(h\nu_{12}),$$

სადაც $A_{12}\rho(h\nu_{12})$ არის $1 \rightarrow 2$ იძულებითი გადასვლის ალბათობის პროპორციული სიდიდე, N_1 და N_2 არის 1 და 2 მდგომარეობის სიმკვრივე და f — ფერმი-დირაკის ფუნქცია. $N_2 f_1$ არის ელექტრონების სიმკვრივე ქვედა დონეზე, ხოლო $N_1 (1 - f_2)$ — ხვრელების სიმკვრივე ზედა დონეზე რეკომბინაციის სიჩქარე

$$R_{21} = A_{21} N_2 f_2 N_1 (1 - f_1) \rho(h\nu_{12}) + B_{12} N_2 f_2 N_1 (1 - f_1).$$

პირველი წევრი ეთანადება იძულებითი გადასვლების შედეგად რეკომბინაციას, რომელიც პროპორციულია ფოტონების რიცხვისა, მეორე წევრი აგვიწერს სპონტანური გადასვლების შესაბამის რეკომბინაციას. ეს უკანასკნელი კი ფოტონების რიცხვზე დამოკიდებული არ არის. R_{21} არის სპონტანური გადასვლის ალბათობის პროპორციული სიდიდე. სიბუთრი წონასწორობის დროს $G_{12} = R_{21}$, ე. ი.

$$A_{12} N_1 f_1 (1 - f_2) \rho(h\nu_{12}) = [A_{21} \rho(h\nu_{12}) + B_{21}] f_2 (1 - f_1),$$

მაგრამ $A_{12} = A_{21}$, გარდა ამისა, ადვილი საჩვენებელია, რომ

$$\frac{f_1 (1 - f_2)}{f_2 (1 - f_1)} = e^{\frac{E_2 - E_1}{k_0 T}}.$$

ამრიგად

$$A_{21} \rho (h\nu_{12}) \left[e^{\frac{E_2 - E_1}{k_0 T}} - 1 \right] = B_{21},$$

ანდა

$$\frac{B_{21}}{A_{21}} = \frac{8\pi n^3 \cdot h\nu_{12}^2}{c^3} \left(e^{\frac{E_2 - E_1}{k_0 T}} \right) \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu_{12}}{k_0 T}} - 1}.$$

რადგანაც

$$E_2 - E_1 = h\nu_{12},$$

ამიტომ იძულებითი და სპონტანური რეკომბინაციის ალბათობათა შეფარდება

$$\frac{p_{sp}}{p_{st}} = \frac{B}{A} \cdot \frac{1}{\rho} = e^{\frac{h\nu_{12}}{k_0 T}} - 1. \quad (9.30)$$

იძულებითი რეკომბინაციის დროს ხდება ფოტონების გენერირება, რომლებსაც აქვთ იგივე ფაზა და სიხშირე, რაც დაცემულ ფოტონებს. სპონტანური რეკომბინაცია გვაძლევს ფოტონებს, რომლებიც ვრცელდებიან ნებისმიერი მიმართულებით, ნებისმიერი ფაზით და სიხშირით. წონასწორობის დროს ძირითადად გვაქვს სპონტანური რეკომბინაცია. მაგრამ, თუ სისტემა არ იმყოფება წონასწორობაში, მაგალითად, თუ მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში ელექტრონების მეტი რიცხვი გვაქვს, ვიდრე უფრო დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში, მაშინ რეკომბინაცია ძირითადად იქნება იძულებითი. სწორედ ეს პირობებია გამოყენებული ლაზერულ გამოსხივებაში.

თ ა ვ ი X

სხეულის ზოგიერთი მაგნიტური თვისება

§ 1. პარამაგნიტური, დიამაგნიტური და ფერომაგნიტური სხეულები

მაგნიტური თვისებების მიხედვით სხეულები სამ ჯგუფად იყოფა: დიამაგნიტური, პარამაგნიტური და ფერომაგნიტური. დიამაგნიტურს შეადგენენ ის სხეულები, რომელთა მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი ნაკლებია ერთზე, ასეთებია: პრაქტიკულად ყველა მარტივი იზოლატორი და მარტივი მეტალების თითქმის ნახევარი. პარამაგნიტური სხეულებისათვის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი ცოტათი მეტია ერთზე, ასეთებია: დანარჩენი იზოლატორები, მეტალების უმეტესი ნაწილი (რკინის, ნიკელისა და კობალტის გამოკლებით). ფერომაგნიტური სხეულებისათვის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი ბევრად აღემატება ერთს (რამდენიმე ათასის რიგისა), ასეთებია: რკინა, ნიკელი, კობალტი და სხვა.

დიამაგნიტიზმისა და პარამაგნიტიზმის ფიზიკური არსი ახსნილ იქნა ლანჯევენის მიერ, რომელიც მდგომარეობს შემდეგში: ატომის გულის გარშემო მბრუნავი ელექტრონი (ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობა). წარმოადგენს წრიულ დენს. ეს უკანასკნელი კი თავის გარშემო ქმნის მაგნიტურ ველს ისე, როგორც ყოველი მაგნიტი. ამიტომ ყოველ ატომს შეიძლება შევესაბამოთ მცირე ზომის მაგნიტი, რომლის მაგნიტური მომენტი არის μ .

ზოგიერთ სხეულში ატომური მაგნიტური მომენტები მოცულობაში გაბნეულია ქაოსურად, ამიტომ მათი საშუალო მნიშვნელობა ნულის ტოლია—სხეული დამაგნიტებელი არ არის. მაგრამ, როდესაც სხეული იმყოფება გარეგან მაგნიტურ ველში, მაშინ გარეგანი მაგნიტური მომენტები შეეცდებიან დადგენ გარეგანი ველის პარალელურად. ამ მდგომარეობას შეესაბამება პოტენციალური ენერგიის მინიმუმი. მაგრამ მაგნიტების ამ მობრუნებას ხელს უშლის მოლეკულების სითბური მოძრაობა, რომელსაც მაგნიტური დიპოლები გადაჰყავს ქაოსურ მოძრაობაში.

ამ ორი ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულების ფაქტორების მოქმედების შედეგად მიიღება მაგნიტური დიპოლების გარკვეულ სიდიდეზე

მოპრუნება ველის მიმართულებით (ამ მოვლენას უწოდებენ მაგნიტური პოლარიზაციის მოვლენას), რის შედეგადაც სხეული დამაგნიტდება.

თუ გამოვთვლით 1 სმ³ მოცულობისათვის მაგნიტური დიპოლების გეომეტრიულ ჯამს, მივიღებთ პოლარიზაციის ანდა დამაგნიტების J ვექტორს. აღნიშნული მოვლენა — ელემენტარული მაგნიტური მომენტების პოლარიზაცია გარეგან მაგნიტურ ველში, იძლევა სხეულის პარამაგნეტიზმს. ზემოთ მოცემული განმარტების თანახმად, პარამაგნეტიზმი არსებითად უნდა იყოს დამოკიდებული სხეულის ტემპერატურაზე, მართლაც: დაბალ ტემპერატურაზე და მაღალ მაგნიტურ ველებში, ველის მაორიენტირებელი გავლენა ბევრად მეტი იქნება ტემპერატურის დეზმაორიენტირებელ მოვლენასთან შედარებით, ამიტომ თითქმის ყველა მაგნიტური მომენტი ორიენტირებული იქნება გარეგანი ველის პარალელურად. ამ მდგომარეობას ეთანადება ნაჯერი დამაგნიტება. მაღალ ტემპერატურაზე და დაბალ გარეგან ველებში ტემპერატურის დეზმაორიენტირებელი გავლენა — დიპოლების ქაოსურ მდგომარეობაში გადაყვანა, იქნება არსებითი ველის მაორიენტირებელ გავლენასთან შედარებით. ატომის მაგნიტური მომენტი წარმოიშობა როგორც ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობით, ისე სპინით. როგორც წესი, მაგნიტური მომენტი ისეთ მოლეკულებს აქვს, რომლებსაც გააჩნიათ ელექტრონების კენტი რიცხვი, ანდა რომელთა ელექტრონული შიდა შრეები ნაწილობრივ არიან შევსებული, ესენია გარდამავალი ელემენტები.

მაგალითად, გარდამავალ ელემენტებს მიეკუთვნება ლანთანოიდები (იშვიათი მიწის ელემენტები), რომლებსაც გააჩნიათ ნაწილობრივ შევსებული 4f შრე. გარდა იშვიათი მიწის ელემენტებისა, არსებობს ელემენტების ოთხი ჯგუფი, რომელთა ელექტრონული შიდა შრეები ნაწილობრივ არიან შევსებული, ესენია:

1. რკინის ჯგუფი ($x=21$ დან $x=28$ -მდე).
მათ აქვთ ნაწილობრივ შევსებული 3d შრე.
2. პალადიუმის ჯგუფი ($x=39$ დან $x=45$ -მდე)
მათ აქვთ ნაწილობრივ შევსებული 4d შრე.
3. პლატინიუმის ჯგუფი ($x=71$ დან $x=78$ -მდე)
მათ აქვთ ნაწილობრივ შევსებული 5d შრე.
4. აქტინიდების ჯგუფი ($x=88$ დან $x=92$ -მდე)
მათ აქვთ ნაწილობრივ შევსებული 6d შრე.

ყველა ეს ელემენტი პარამაგნიტებია, რაც მიგვითითებს იმაზე, რომ მოლეკულის მაგნიტური მომენტი ძირითადად გამოწვეულია არა ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობით, არამედ. მათი სპინებით, ამიტომ დამაგნიტება იქნება შედარებით ნაკლები. სხვანაირად რომ ვთქვათ, სხეულის პარამაგნეტიზმი უნდა ეცემოდეს ტემპერატურის გადიდებით. ცდაც და თეორიაც ადასტურებს ამ ფაქტს, გარდა ელექტრონული გაზისა მეტა-

ლებში, რომელთა პარამაგნეტიზმი ტემპერატურისაგან დამოკიდებული არ არის; ახლა განვიხილოთ შემთხვევა, როდესაც ატომს (მოლეკულას) არ გააჩნია მუდმივი მაგნიტური მომენტი μ . ამ შემთხვევაში, გარეგანი მაგნიტური ველი ელექტრონის ორბიტალურ მოძრაობაზე გარკვეულ გავლენას ახდენს. ელექტრომაგნეტიზმიდან ცნობილია, რომ ჩაკეტილ ელექტრულ წრიულ კონტურში (ამ შემთხვევაში ასეთ ჩაკეტილ კონტურს წარმოადგენს ატომში ელექტრონის წრიული მოძრაობა) გარეგანი მაგნიტური ველი ახდენს ინდუცირებას ისეთი მიმართულების დენისა, რომლის მაგნიტური ველი ეწინააღმდეგება წარმოშობ ველს (ლენცის წესი). ეს უკანასკნელი დაკავშირებულია დიამაგნეტიზმთან. ამ განმარტების თანახმად, დიამაგნეტიზმი ტემპერატურაზე დამოკიდებული არ უნდა იყოს და, გარდა ამისა, როგორც ელექტრომაგნიტური ინდუქციით გამოწვეული ეფექტი—დამაგნიტება, მათი მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი უარყოფითი უნდა იყოს. ასეთია ფიზიკური არსი დიამაგნეტიზმისა და პარამაგნეტიზმისა, რომელიც, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, პირველად მოგვცა ლანჯევენმა. ფერომაგნეტიზმის ფიზიკური არსი გახსნილ იქნა გაიზენბერგის მიერ, კვანტური მექანიკის საფუძველზე. ამიტომ, უპირველეს ყოვლისა, განვიხილოთ დიამაგნიტური და პარამაგნიტური სხეულების როგორც კლასიკურ (ლანჯევენის), ისე კვანტურ თეორიას და, ბოლოს მოკლედ შევხებით ფერომაგნეტიზმის კლასიკურ თეორიას.

§ 2. პარამაგნეტიზმის კლასიკური და კვანტური თეორიები

ა) პარამაგნეტიზმის კლასიკური თეორია. როგორც შესავალში აღვნიშნეთ, სხეულის პარამაგნეტიზმი დაკავშირებულია ატომების (მოლეკულების) დიპოლური მომენტების ორიენტაციასთან გარეგან მაგნიტურ ველში. აღვნიშნოთ ატომის მაგნიტური დიპოლური მომენტი μ -თი. თუ იგი იმყოფება გარეგან H მაგნიტურ ველში, მაშინ მაგნიტური დიპოლის პოტენციალური ენერგია გარეგან ველში იქნება:

$$U = -\mu H = -\mu H \cos \theta,$$

სადაც θ არის კუთხე მაგნიტურ დიპოლსა და გარეგან H ველს შორის ბოლცმანის კანონის თანახმად, ალბათობა იმისა, რომ მაგნიტური დიპოლი გარეგან H ველში ორიენტირებულია θ კუთხით, ანდა ალბათობა იმისა, რომ მაგნიტურ დიპოლს გააჩნია ენერგია U , გამოისახება შემდეგი ფორმულით

$$W = Ae^{-\frac{U}{kT}} = Ae^{-\frac{\mu H \cos \theta}{kT}}.$$

კოეფიციენტი A განისაზღვრება ალბათობის ერთზე ნორმირების პირობიდან

$$\int W d\gamma = 1 \text{ აქედან } A = \frac{1}{\int e^{\frac{\mu H \cos \theta}{kT}} d\gamma},$$

სადაც $d\gamma = r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi$ მოცულობის ელემენტი. ამრიგად, მაგნიტური დიპოლის მომენტის გეგმილის საშუალო მნიშვნელობა, გარეგანი H ველის მიმართულებით, გამოითვლება შემდეგნაირად:

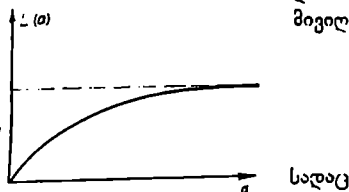
$$\overline{\mu_H} = \overline{\mu \cos \theta} = \frac{\int_0^\pi \mu \cos \theta e^{\frac{\mu H \cos \theta}{kT}} \sin \theta d\theta}{\int_0^\pi e^{\frac{\mu H \cos \theta}{kT}} \sin \theta d\theta}.$$

თუ აღვნიშნავთ $\frac{\mu H}{kT} = a$ და $\cos \theta = u$, მივიღებთ

$$\begin{aligned} \overline{\mu_H} &= \mu \frac{\int_{-1}^1 u e^{au} du}{\int_{-1}^1 e^{au} du} = \mu \frac{\partial}{\partial a} \ln \int_{-1}^1 e^{au} du = \mu \frac{\partial}{\partial a} \ln \frac{e^a - e^{-a}}{a} = \\ &= \mu \left(\operatorname{cth} a - \frac{1}{a} \right). \end{aligned}$$

თუ $\overline{\mu_H}$ გავამრავლებთ 1 სმ³ მოცულობაში მოთავსებული მაგნიტური დიპოლების (მოლეკულების) რიცხვზე, მივიღებთ დამაგნიტების J ვექტორს

$$\begin{aligned} J &= \frac{N}{V} \mu \left(\operatorname{cth} a - \frac{1}{a} \right) = \\ &= \frac{N}{V} \mu L(a), \end{aligned} \quad (10.1)$$



ნახ. 83.

$$L(a) = \operatorname{cth} a - \frac{1}{a}. \quad (6.2)$$

$L(a)$ -ს ეწოდება ლანჯევენის ფუნქცია, მისი გრაფიკი ნაჩვენებია ნახ. 83-ზე. ძალიან დიდი გარეგანი ველის, ანდა დაბალ ტემპერატურაზე

$a = \frac{\mu H}{kT} \rightarrow \infty$, ლანჯევენის ფუნქცია $L(a) \rightarrow 1$, ამ დროს მიიღება

ნაჭერი დამაგნიტება

$$J = \frac{N}{V} \mu = J_0.$$

მცირე სიდიდის გარეგანი ველის, ანდა მაღალი ტემპერატურის შემთხვევაში $a \rightarrow 0$, ამ შემთხვევაში ლანჟევენის $L(a)$ ფუნქციის დაშლა მჭკრივად a -ს ხარისხებად იძლევა $L(a) \rightarrow \frac{1}{3}a$, ამ დროს პოლარიზაციის ექვტორი

$$J = \frac{N}{V} \cdot \frac{\mu^2 H}{3kT}. \quad (10.3)$$

აქედან მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტისათვის ვღებულობთ შემდეგ ფორმულას

$$\chi = \frac{I}{H} = \frac{N}{V} \cdot \frac{\mu^2}{3kT} = \frac{C}{T}. \quad (10.4)$$

$$C = \frac{N}{V} \frac{\mu^2 N}{3k}. \quad (10.4a)$$

მაშასადამე, პარამაგნიტური სხეულების მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი აბსოლუტური ტემპერატურის უკუპროპორციულია. ამ კანონს უწოდებენ კიურის კანონს, C -ს—კიურის მუდმივას. ზოგიერთი პარამაგნიტური სხეულებისათვის სამართლიანია კიური-ვეისის ფორმულა

$$\chi = \frac{C}{T \pm \Delta}. \quad (10.5)$$

კიურის ფორმულის მიღების დროს ჩვენ ვგულისხმობდით, რომ ყოველ მაგნიტურ დიპოლზე მოქმედებს მხოლოდ გარეგანი H ველი. სინამდვილეში კი, ყოველ მაგნიტურ დიპოლზე მოქმედებს ეფექტური ველი, რომელიც უდრის გარეგანი და შინაგანი ველების ჯამს

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{გარ.}} + H_{\text{შინ.}}$$

პარამაგნიტური სხეულებისათვის $H_{\text{შინ.}} \ll H_{\text{გარ.}}$, ამიტომ მას უგულებელყოფენ, რის შედეგად მიიღება კიურის კანონი. როდესაც $H_{\text{შინ.}}$ უგულებელყოფა არ შეიძლება (როგორც ამას ქვემოთ დავინახავთ), მიიღება კიური-ვეისის ფორმულა.

ბ) პარამაგნეტიზმის კვანტური თეორია

პარამაგნეტიზმის განხილვის დროს ჩვენ ვგულისხმობდით, რომ ატომის მაგნიტური მომენტი μ შეიძლება ნებისმიერი კუთხით იყოს ორიენტირებული გარეგანი H მაგნიტური ველის მიმართ, ამიტომ $\overline{\mu_H} = \overline{\mu \cos \theta}$ სიდიდის გამოთვლის დროს ინტეგრირება ვაწარმოეთ θ კუთხის ყველა

მნიშვნელობით 0-დან π -მდე. ასეთი დაშვება სამართლიანია მხოლოდ ძალიან მაღალ ტემპერატურაზე. რადგანაც ამ დროს მთლეკულების სითბური ენერგია kT ბევრად აღემატება მაგნიტური დიპოლის ენერგიას გარე ველში ($-\mu H \cos \theta$), რის გამოც გარეგანი ველის მაორიენტირებელი გავლენა სუსტია. სითბურ მოძრაობას მაგნიტური დიპოლები გადაჰყავს ნებისმიერი ორიენტაციის მდგომარეობაში. მდგომარეობა არსებითად იცვლება დაბალ ტემპერატურაზე. ამ დროს სითბური მოძრაობის გავლენა სუსტია, სამაგიეროდ ძლიერია გარეგანი ველის მაორიენტირებელი გავლენა, რის გამოც, მაგნიტურ დიპოლს არ შეუძლია ჰქონდეს ნებისმიერი ორიენტაცია გარეგანი ველის მიმართ. კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ დაბალი ტემპერატურისა და დიდი მაგნიტური ველის შემთხვევაში, ატომის მაგნიტური მომენტი μ ღებულობს დისკრეტულ ორიენტაციებს გარეგანი ველის მიმართ და შეესაბამება მაგნიტური მომენტის დისკრეტული მნიშვნელობები, რომელიც მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$\mu^2 = j(j+1)g^2\beta^2, \quad (10.6)$$

სადაც $j=0,1,2,\dots$ არის მაგნიტური კვანტური რიცხვი

$$\beta = \frac{e\hbar}{4\pi mc} \text{ — ბორის მაგნეტონი}$$

$$\text{და } g = 1 + \frac{s(s+1) + j(j+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \text{ — ლანდეს მამრავლი,}$$

აქ s სპინია, l — ორბიტალური მოძრაობის მომენტი. აქ არ შევიჩრდებით g და β სიდიდეების ფიზიკურ შინაარსზე და მათ გამოყვანაზე, აღვნიშნავთ მხოლოდ იმას, რომ ისინი გარკვეულ მუდმივ სიდიდეებს წარმოადგენენ. კვანტური მექანიკა გვიჩვენებს, რომ j -ს გარკვეულ მნიშვნელობას შეესაბამება მაგნიტური მომენტის $2j+1$ სხვადასხვა ორიენტაცია გარეგანი მაგნიტური ველის მიმართ. მაგნიტური მომენტის სხვადასხვა ორიენტაციას, ანდა მაგნიტური მომენტის გვემილს ველის მიმართულებაზე განსაზღვრავს m კვანტური რიცხვი

$$\mu_m = mg\beta, \quad (10.7)$$

$$\text{სადაც } -j \leq m \leq j$$

m ღებულობს $2j+1$ მნიშვნელობებს. კვანტური ენით რამ ვთქვათ, j დონე $2j+1$ ჯერადად გადაგვარებულია. დიპოლის შესაძლო ენერგიისათვის ვღებულდბთ

$$E_m = -\mu_m H = -mg\beta H.$$

სტატისტიკური ჯამისათვის გუქნება

$$Z = \sum_{-j}^j e^{\frac{mg\beta H}{kT}}. \quad (10.8)$$

აქედან მაგნიტური ველის მიმართულებით ატომის მაგნიტური მომენტის პროექციის საშუალო მნიშვნელობა მიიღება მ კუთხის შესაძლო ორიენტაციით, აჯამვის გზით, ე. ი.

$$\bar{\mu} = \frac{\sum_{-j}^j m g \beta e^{\frac{mg\beta H}{kT}}}{\sum_{-j}^j e^{\frac{mg\beta H}{kT}}}. \quad (10.9)$$

მაღალ ტემპერატურაზე (ან სუსტი მაგნიტური ველის შემთხვევაში, (10.9) ფორმულა გვაძლევს კლასიკურ შედეგს. მართლაც, როდესაც $\frac{g\beta H}{kT} < 1$, ვღებულობთ

$$\bar{\mu} = \frac{\sum_{-j}^j m g \beta \left\{ 1 + \frac{mg\beta H}{kT} + \frac{1}{2} \cdot \frac{m^2 g^2 \beta^2 \mu^2}{(kT)^2} + \dots \right\}}{\sum_{-j}^j \left(1 + \frac{mg\beta H}{kT} + \frac{1}{2} \frac{m^2 g^2 \beta^2 H^2}{(kT)^2} + \dots \right)}$$

თუ მხედველობაში მივიღებთ, რომ

$$\sum_{-j}^j m = 0 \quad \text{და} \quad \sum_{-j}^j m^2 = \frac{j(j+1)(2j+1)}{3},$$

მაშინ პირველი მიახლოებით გვექნება

$$\bar{\mu} = \frac{g^2 \beta^2 j(j+1) H}{3 k T},$$

მაგრამ $j(j+1)g^2 \beta^2 = \mu^2$, ამიტომ

$$\bar{\mu} = \frac{\mu^2 H}{3 k T} \quad \text{ან} \quad J = \frac{N}{V} \frac{\mu^2 H}{3 k T},$$

რაც ზუსტად ემთხვევა კლასიკურ ფორმულას (10.3).

(10.9) გამოსახულება შეიძლება აჯამული იქნეს მაჩვენებლიანი ფუნქციის მწკრივად დაშლის გარეშე. მართლაც, თუ აღვნიშნავთ

$$e^{\frac{\beta g H}{k T}} = x,$$

მივიღებთ:

$$\bar{\mu} = g\beta \frac{\sum_{-j}^j m x^m}{\sum_{-j}^j x^m} = g\beta x \frac{\partial}{\partial x} \ln \sum_{-j}^j x^m \quad (10.10)$$

როდესაც j ძალიან დიდია, ე. ი. მაგნიტური მომენტის გვერდითი მაგნიტური ველის მიმართულებაზე თითქმის უწყვეტ რიგს აღგენს, მაშინ

$$\sum_{-j}^j x^m \simeq \frac{1}{1-x}.$$

ამ უპირობო შეტანა (10.10) ფორმულაში, $\bar{\mu}$ -თვის გვაძლევს კლასიკურ შედეგს. როდესაც j სასრულო რიცხვია, მაშინ გამოვიყენებთ შემდეგ ფორმულას

$$\sum_{-j}^j x^m = x^{-j} \sum_0^{2j} x^n = \frac{x^{-j} - x^{j+1}}{1-x} = \frac{x^{j+1/2} - x^{-(j+1/2)}}{x^{1/2} - x^{-1/2}}.$$

ამრიგად,

$$x \frac{\partial}{\partial x} \ln \sum_{-j}^j x^m = (j+1/2) \frac{x^{j+1/2} + x^{-(j+1/2)}}{x^{j+1/2} - x^{-(j+1/2)}} - \frac{1}{2} \frac{x^{1/2} + x^{-1/2}}{x^{1/2} - x^{-1/2}}.$$

განვსაზღვროთ ბრილუენის ფუნქცია $B_j(y)$ შემდეგი ტოლობით:

$$B_j(y) = \frac{j+1/2}{j} \operatorname{cth} \frac{j+1/2}{j} y - \frac{1}{2j} \cdot \operatorname{cth} \frac{1}{2j} y, \quad (10.11)$$

მაშინ განტოლება (10.9) ჩაიწერება შემდეგი სახით:

$$\bar{\mu} = jg\beta B_j(y), \quad (10.12)$$

სადაც

$$y = \frac{jg\beta H}{kT}.$$

ბრილუენის ფუნქციის გრაფიკი j -ს რამდენიმე მნიშვნელობისათვის ნაჩვენებია ნახ. 84-ზე. იგი ძალიან წააგავს ლანჯევენის ფუნქციას. დიდი j -ს შემთხვევაში, როდესაც $y \ll 1$, ბრილუენის ფუნქციის მწკრივად დაშლა გვაძლევს:

$$B_j(y) \simeq \frac{1}{3} j(j+1)y/j^2.$$

ამ მიახლოების საფუძველზე (6.12) გამოსახულება გვაძლევს:

$$\bar{\mu} = \frac{1}{3} \frac{\mu^2 H}{kT} \text{ ანდა } X = \frac{N}{V} \frac{\mu^2}{3kT},$$

რაც ემთხვევა კლასიკურ შედეგს (10.5).

როდესაც $y \gg 1$, (10.11) განტოლება გვაძლევს $B_j(y) \simeq 1$, ამიტომ

$$\bar{\mu} = jg\beta.$$

ეს არის ნაწერი დამაგნიტება.

ახლა განვიხილოთ როგორია თეორიასა და ცდას შორის დამთხვევა იშვიათი მიწის ელემენტების შემთხვევაში ცდასა და თეორიას შორის დამთხვევა ძალიან კარგია: $T > 10^4 K$ ზუს-

ტად სრულდება კიურის კანონი $\chi \sim \frac{1}{T}$.

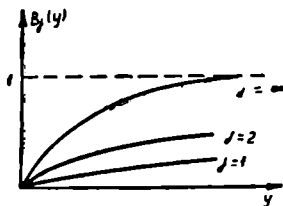
გარდა ამისა, პროპორციულობის კოეფიციენტის რიცხვითი მნიშვნელობა ზუსტად მოიცემა (10.4ა) ფორმულით, სადაც g და j -ს მნიშვნელობები შეესაბამებიან იზოლირებულ ატომს. ეს გასაგებია, რადგანაც იშვიათი მიწის ელემენტების შემთხვევაში $4f$ შრე ნაწილობრივ შევსებულია.

იგი საკმარისად ღრმად მდებარეობს ატომში. ამ შრის ელექტრონები ეკრანირებული ხდებიან შიდა კრისტალური ელექტრული ველისაგან. ამიტომ, ცხადია, g და j -ს ექნება ის მნიშვნელობები, რომლებიც ეთანადებიან იზოლირებულ ატომებს.

რკინის ჯგუფის შემთხვევაში მდგომარეობა ცოტათი განსხვავებულია.

კიურის კანონი $\chi \sim \frac{1}{T}$ კარგად სრულდება. პროპორციულობის კოეფი-

ციენტის მნიშვნელობა მოიცემა ისევე (10.4ა) ფორმულით. მხოლოდ, თუ j -ს ნაცვლად ($J = L + s$) ავიღებთ s -ს. აქ თითქმის ადგილი აქვს ორბიტალური მომენტის გაყინვას. ეს გარემოება აიხსნება შემდეგნაირად: რკინის ჯგუფის შემთხვევაში ნაწილობრივ შევსებულია $3d$ შრე, რომელიც პერიფერიასთან უფრო ახლოსაა, ამიტომ იგი ნაკლებად ეკრანირებულია შიდა კრისტალური ელექტრული ველისაგან. ცხადია, g და j -ს მნიშვნელობები არ შეესაბამებიან იზოლირებულ ატომებს. შიდა კრისტალური ველი მოქმედებს ორბიტალურ მომენტზე L , იწვევს მის გახლეჩას (შტარკის ეფექტი). შიდა კრისტალური ელექტრული ველი მოქმედებს აგრეთვე სპინზე, მაგრამ შტარკის ეფექტი სპინზე მცირეა და შეიძლება მისი უგულებელყოფა. უმეტეს შემთხვევაში ქვედა დონე, რომელიც მიიღება ორბიტალური შტარკის ეფექტის შედეგად, მარტივია. დანარჩენი



ნახ. 84.

დონეები დაშორებულია საკმარისად დიდ მანძილზე. დასახელებულია მხოლოდ ძირითადი დონე. გადაგვარებას ადგილი არა აქვს, ამიტომ მაგნეტიზმში მონაწილეობას არ ღებულობს (სხვანაირად რომ ვთქვათ, ორბიტალური მომენტი გაყინულია)*.

§ 3. ელემენტარული გაზის პარამაგნეტიზმი

ჩვეულებრივი პარამაგნიტური სხეულებისათვის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი, ლანეჟენის თეორიის მიხედვით, აბსოლუტური ტემპერატურის უკუპროპორციულია (10.6). მაგრამ მთელი რიგი მეტალების (მაგ. ტუტე მეტალების) მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი ტემპერატურის საკმარისად დიდ ფარგლებში ტემპერატურისაგან დამოკიდებული არ არის. ამ ექსპერიმენტული ფაქტის ახსნა პირველად მოგვცა პაულმა 1927 წელს, ფერმი-დირაკის სტატისტიკის გამოყენებით მეტალის ელექტრონული გაზისათვის. პაულმა დაუშვა, რომ ასეთ მეტალებში პარამაგნეტიზმი ძირითადად გამოწვეულია არა მესერის იონების მაგნიტური მომენტით, არამედ გამტარებლობის ელექტრონების სპინთან დაკავშირებული მაგნიტური მომენტებით. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ელექტრონული გაზის პარამაგნეტიზმით. განვიხილოთ მეტალური სხეული, რომელშიაც N კოლექტივიზირებული ელექტრონია და განაწილებულნი არიან $N/2$ კვანტურ მდგომარეობებში წყვილ-წყვილად ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულების სპინებით, როდესაც მეტალური სხეული შეგვაქვს გარეგან H მაგნიტურ ველში. ელექტრონების ზემოთ მოცემული განაწილება შეიცვლება. მაგნიტური ველის მოქმედებით ელექტრონი, რომლის მაგნიტური მომენტი (სპინი) მაგნიტური ველის საწინააღმდეგოდ არის მიმართული, შეეცდება მობრუნდეს და დადგეს ველის პარალელურად. მაგრამ, პაულის აკრძალვის პრინციპის თანახმად, ერთი და იგივე კვანტურ მდგომარეობაში შეუძლებელია ორი ელექტრონი მოთავსდეს ერთნაირი მიმართულების სპინებით. ამიტომ ქვედა შეესებული დონეებიდან ზედა თავისუფალ დონეებზე ელექტრონები გადავლენ, სადაც მათ სპინებს ექნებათ ველის პარალელური ორიენტაცია (ნახ. 85). ცხადია, ელექტრონების ასეთი გადასვლა ზედა დონეებზე იწარმოებს ფერმის დონის მაქლობელი დონეებიდან. გა-

* კრიოგენულ და მაგნიტოგენოზანსულ ცდებში იყენებენ ჰიდრატირებულ პარამაგნიტურ მასალებს (ჰიდრატირებული მარილი პლუს კრისტალიზაციური წყალი). მაგალითად, ცდები ტარდებოდა შემდეგ მარილებზე:

1. კვსცებზე $M'M''(SO_4)_2aq$, სადაც M' ერთვალენტია პარამაგნიტური მეტალებია K, Na, Rb, NH_4 და სხვა, M'' არის სამვალენტია იონი რკინის ჯგუფიდან Fe^{+++}, Cr^{+++} და ა. შ.

2. ტუტონის მარილები $M_2'M''(SO_4)_2 \cdot 6aq$, სადაც M'' არის ორვალენტია იონები Co^{+2}, Cu^{+2} ... ჰიდრატირებულ მარილებში მეზობელ პარამაგნიტურ იონებს შორის მანძილი დიდდება, რის გამოც მათ შორის ურთიერთქმედება სუსტდება.

მოვთვალთ ქვედა ღონეებიდან ზედა თავისუფალ ღონეებზე გადასული ელექტრონების რიცხვი. სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ $\frac{N}{2}$ ღონის მახლობლად მეზობელ ენერგეტიკულ ღონეებს შორის მანძილი დაახლოებით ერთი და იგივეა და უდრის $\Delta\varepsilon$ -ს, მაშინ ელექტრონების კინეტიკური ენერგიის ნაზრდი $\frac{N}{2}$ ღონიდან $\frac{N}{2} + 1$ ღონეზე გადასული ელექტრონებისათვის იქნება $\Delta\varepsilon$.

$\frac{N}{2} - 1$ ღონიდან $\frac{N}{2} + 2$ ღონეზე გადასული ელექტრონებისათვის $3\Delta\varepsilon$

$\frac{N}{2} - (Z-1)''$ $\frac{N}{2} + Z$ " " " $(2Z-1)\Delta\varepsilon$.

ელექტრონების გადასვლა იწარმოებს მანამ, სანამ ქვედა შევსებულ ღონეებიდან ზედა თავისუფალ ღონეებზე ელექტრონის კინეტიკური ენერგიის ნაზრდი არ გაუტოლდება მაგნიტური ენერგიას $2\mu H$ -ს (ელექტრონი მაგნიტური ველის მოქმედებით სპინის ერთი ორიენტაციიდან გადადის მეორეში), ამრიგად

$$(2Z-1)\Delta\varepsilon = 2\mu H.$$

მაგრამ, რადგანაც $Z > 1$, ამიტომ მიახლოებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$2Z \cdot \Delta\varepsilon = 2\mu H,$$

აქედან

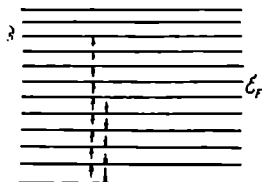
$$2Z = \frac{2\mu H}{\Delta\varepsilon}.$$

მეზობელ ენერგეტიკულ ღონეებს შორის მანძილი $\Delta\varepsilon$ ზოგადად ცვალებადი სიდიდეა, მაგრამ მიახლოებითი გამოთვლების შემთხვევაში იგი შეგვიძლია ჩავთვალოთ მუდმივ სიდიდედ, რომელიც დაახლოებით უდრის $\Delta\varepsilon \approx \frac{E_F}{N/2}$, სადაც E_F არის ფერმის ღონე. ამ მიახლოების საფუძველზე, ელექტრონთა რიცხვი, რომელთა სპინებს აქვთ ერთი და იგივე მიმართულება, იქნება

$$2Z = \frac{\mu H N}{E_F},$$

მაგნიტური მომენტისათვის გვექნება

$$J = 2Z\mu = \frac{\mu^2 N}{E_F} H,$$



ნახ. 85.

აქედან მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი

$$X = \frac{J}{H} = \frac{\mu^2 N}{E_F}, \quad (10.13)$$

რომელიც სრულიად ანალოგიურია ლანჯევენის ფორმულისა. მასში ზოლექულის საშუალო კინეტიკური ენერგია შეცვლილია კოლექტივიზირებული ელექტრონის მაქსიმალური ენერგიით. ეს უკანასკნელი კი ტემპერატურაზე დამოკიდებული არ არის. ამრიგად, ასეთი მეტალების მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი ტემპერატურაზე დამოკიდებული არ არის. (10.13) ფორმულის გამოყენების დროს ჩვენ დავუშვიტ, რომ მეზობელ ენერგეტიკულ დონეებს შორის მანძილი მუდმივი სიდიდეა. უფრო ზუსტი გამოთვლები, რომლებიც ამ დაშვებას არ ეყრდნობა, მაგნიტური ამთვისებლობისათვის იძლევა შემდეგ ფორმულას

$$X = \frac{2}{3} \frac{\mu^2 N}{E_F}. \quad (10.14)$$

ზემომოყვანილი თეორია ითვალისწინებს მხოლოდ ელექტრონის სპინს, მაგრამ არ ითვალისწინებს ელექტრონის ორბიტალური მოძრაობის ცვლილებას გარეგან მაგნიტურ ველში. ეს უკანასკნელი დაკავშირებულია დიამაგნეტიზმთან (დიამაგნეტიზმის თეორია განხილული იქნება მორიგ პარაგრაფში). იგი თავისუფალი ელექტრონებისათვის გამოთვალა ლან-

დაუმ კვანტური მექანიკის გამოყენებით და გვიჩვენა, რომ ეს ეფექტი იძლევა დამატებით მაგნიტურ მომენტს, რომელსაც აქვს პარამაგნეტიზმის საწინააღმდეგო ნიშანი და სიდიდით უდრის მის მესამედს, ე. ი. $\chi_{\text{ლაი}} = -$

$\frac{1}{3} \chi_{\text{პარ.}}$ ამრიგად, ელექტრონული გაზის

სრული მაგნიტური ამთვისებლობა უდრის

$$\chi = \chi_{\text{ლაი}} + \chi_{\text{პარ.}} = \frac{2}{3} \chi_{\text{პარ.}} = \frac{\mu^2 N}{E_F}.$$

ცხრილში მოცემულია ზოგიერთი მეტალის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტის ექსპერიმენტული და (10.14) ფორმულით გამოთვლილი მნიშვნელობები. როგორც ვხედავთ, თეორიასა და ექსპერიმენტს შორის თანხმობა დამაკმაყოფილებელია Na და K -თვის, Rb და Cs -სათვის კი — არადასაკმაყოფილებელი. ეს გარემოება იმით აიხსნება, რომ ასეთი მეტალებისათვის აუცილებელია მხედველობაში იყოს მიღებული იონების დიამაგნეტიზმიც.

§ 4. დიამაგნეტიზმის კლასიკური და კვანძური თეორიები

ა) დიამაგნეტიზმის კლასიკური თეორია (ლანჯევენის თეორია)

ახლა განვიხილოთ ის გავლენა, რომელსაც გარეგანი მაგნიტური ველი ახდენს ელექტრონების ორბიტალურ მოძრაობაზე. სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ ელექტრონები ატომის ბირთვის გარშემო აღწერენ წრიულ ღარბიტებს. სტაციონარულ მდგომარეობაში ატომის ბირთვის დადებით და უარყოფით მუხტებს შორის მიზიდულობის ძალა უნდა იქნეს გაბათილებული ცენტრგამრიდი ძალით, ე. ი.

$$m\omega_0^2 r = \frac{e^2}{r^2},$$

აქედან

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{e^2}{mr^3}}. \quad (10.15)$$

სადაც ω_0 არის ატომში ელექტრონის წრიული მოძრაობის სიხშირე, m — ელექტრონის მასა და r — წრიული ორბიტის რადიუსი.

დავუშვათ, რომ ელექტრონის მოძრაობის სიბრტყის პერპენდიკულარულად მოღებულია გარეგანი მაგნიტური ველი H , მაშინ ელექტრონზე იმოქმედებს დამატებით ლორენცის ძალა

$$F = \frac{e}{c} (v \times H).$$

მაგრამ ჩვენი დაშვების თანახმად, $v \perp H$, ამიტომ

$$F = \frac{e}{c} v \cdot H,$$

ანდა

$$F = \frac{e}{c} r\omega H, \\ (v = r\omega).$$

ახლა ატომის სტაციონარული მდგომარეობა მიიღება ზემოთ აღნიშნული ძალების გაწონასწორების შედეგად, ე. ი.

$$m\omega^2 r + \frac{e}{c} r\omega H = \frac{e^2}{r^2},$$

ანდა

$$\omega^2 + \frac{eH}{mc} \omega - \omega_0^2 = 0.$$

აქედან

$$\omega = -\frac{eH}{2mc} \pm \sqrt{\left(\frac{eH}{2mc}\right)^2 + \omega_0^2}.$$

$$\frac{eH}{2mc} \ll \omega_0,$$

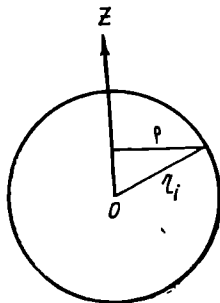
გვექნება

$$\omega = \omega_0 - \frac{eH}{2mc}.$$

ამრიგად, მაგნიტური ველის გავლენა ატომზე გვაძლევს ელექტრონის დამატებით ბრუნვას სიხშირით

$$\omega_L = -\frac{eH}{2mc}, \quad (10.16)$$

რომელსაც ლარმოლის სიხშირეს უწოდებენ. აქ ნიშანი მინუსი მაჩვენებელია იმისა, რომ ეს დამატებითი ბრუნვა, თანახმად ინდუქციის კანონისა, ხდება ელექტრონის პირვანდელი ბრუნვის საწინააღმდეგო მიმართულებით. ელექტრონის ამ დამატებით ბრუნვას ეთანადება წრიული დენი,



ნახ. 86.

$$i = \frac{e}{c} v_L = \frac{e}{c} \frac{\omega_L}{2\pi} = -\frac{e}{4\pi mc^2} H.$$

ელექტროდინამიკიდან ცნობილია, რომ i წრიულ დენს, რომელიც გარს უვლის $S = \pi r^2$ ფართს, ეთანადება მაგნიტური მომენტი

$$M = iS.$$

ამრიგად, დამაგნიტების ვექტორისათვის გვექნება

$$J = \frac{N}{V} iS = -\frac{N}{V} \pi r^2 \frac{e^2}{4\pi mc^2} H,$$

ატომი შეიცავს რამდენიმე ელექტრონს, ამიტომ დამაგნიტების ვექტორის J მისაღებად უნდა ავიღოთ $\overline{\rho^2}$, რომელიც, თანახმად ნახ. 86-ისა, უდრის

$$\overline{\rho^2} = \sum \overline{(x_i^2 + y_i^2)} = \frac{2}{3} \sum \overline{r_i^2}.$$

აქ აჯამვა ხდება ატომში შემავალი ყველა ელექტრონისათვის. მაშასადამე, დამაგნიტების ვექტორისათვის მივიღებთ:

$$J = -\frac{N}{V} \frac{e^2}{4mc^2} H \sum \overline{(x_i^2 + y_i^2)} = -\frac{N}{V} \frac{e^2 H}{6mc^2} \sum \overline{r_i^2}.$$

აქედან მაგნიტური ამთვისებლობისათვის გვექნება:

$$\chi = \frac{J}{H} = -\frac{N}{V} \cdot \frac{e^2}{6mc^2} \sum \overline{r_i^2}. \quad (10.17)$$

როგორც ვხედავთ, მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტს უარყოფითი ნიშანი აქვს და ტემპერატურაზე დამოკიდებული არ არის. თანახმად (10.17) ფორმულისა, სხვადასხვა ნივთიერების ატომისათვის უნდა გამოითვალოს საშუალო კვადრატული $\overline{r^2}$, რომელიც თავის მხრივ მოითხოვს სათანადო სისტემის ტალღური ფუნქციის ცოდნას. ამიტომ $\overline{r^2}$ -ის გამოთვლა დაკავშირებულია საკმარისად რთულ მათემატიკურ ოპერაციასთან. საჭიროა აღინიშნოს, რომ დიამაგნიტური ამთვისებლობა გააჩნია აგრეთვე პარამაგნიტურ სხეულებსაც, მაგრამ ეს უკანასკნელი რამდენიმე რიგით მეტია დიამაგნიტურ ამთვისებლობასთან შედარებით, ამიტომ პარამაგნიტური სხეულებისათვის შესაძლებელია დიამაგნეტიზმის უგულებელყოფა.

ბ) დიამაგნეტიზმის კვანტური თეორია

ვთქვათ ატომი მოთავსებულია გარეგან H ველში. ასეთი სისტემის ჰამილტონიანს აქვს შემდეგი სახე:

$$\hat{H} = \sum \frac{1}{2m} (p_i + \frac{e}{c} A_i)^2 + V - \sum e\varphi_i + \sum \frac{e}{mc} \sigma_i \text{rot } A_i, \quad (10.18)$$

სადაც p_i არის i -ური ელექტრონის იმპულსის ოპერატორი, φ და A — სკალარული და ვექტორული ოპერატორები, შესაბამისად, V — ელექტრონთა სისტემის შინაგანი ელექტროსტატიკური პოტენციალი და $\frac{e\sigma_i}{mc}$ — i -ური ელექტრონის სპინური მაგნიტური მომენტი. თუ გარეგანი ველი H ერთგვაროვანია, მაშინ

$$A = \frac{1}{2} H \times r.$$

თუ A -ს მნიშვნელობას შევიტანთ (10.18) ფორმულაში, მივიღებთ:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_i & \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \frac{e}{2mc} H_z \cdot \frac{\hbar}{i} \left(x_i \frac{\partial}{\partial y_i} - y_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\hbar^2 e^2}{8mc^2} (x_i^2 + y_i^2) \right] + V - \sum e\varphi + \sum \frac{e}{mc} H_z \sigma_{zi}, \end{aligned} \quad (10.18a)$$

ოპერატორი

$$\frac{\hbar}{i} \sum \left(x_i \frac{\partial}{\partial y_i} - y_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) = \sum m_{zi}$$

წარმოადგენს სრული მოძრაობის მომენტის z კომპონენტს. თუ გავაერ-

თანებთ წევრებს, რომლებიც შეიცავენ H_z -ს პირველი ხარისხით, მივიღებთ:

$$H_z \frac{e}{2mc} \sum (m_{zi} + 2\sigma_{zi}).$$

H_z -ის წინმდგომი კოეფიციენტი, აღებული შებრუნებული ნიშნით, წარმოადგენს x კომპონენტს სრული მომენტისა, რომელიც შედგება ორბიტალური მოძრაობისა და სპინმომენტის ჯამისაგან.

(10.18a) ფორმულაში მაგნიტური ველისაგან დამოკიდებულია აგრეთვე წევრი, რომელიც შეიცავს H_z^2 -ს. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, დიამაგნიტური სხეულებისათვის სრული მაგნიტური მომენტი ნულის ტოლია, ე. ი.

$$\frac{e}{2mc} \sum (m_{zi} + 2\sigma_{zi}) = 0.$$

ამიტომ ჰამილტონიანში გვრჩება წევრი, რომელიც H_z^2 -ის პროპორციულია. მეორე მხრივ, ცნობილია, რომ ჰამილტონიანის საშუალო მნიშვნელობა წარმოადგენს ენერგიას. მაშასადამე, დიამაგნიტური სხეულების შემთხვევაში დამატებითი ენერგია, რომელიც ეთანადება მაგნიტურ ველს, იქნება შემდეგი:

$$\Delta E = \frac{H_z^2 e^2}{8mc^2} \frac{N}{V} \sum \overline{(x_i^2 + y_i^2)} = \frac{H_z^2 e^2}{12mc^2} \frac{N}{V} \sum \overline{r_i^2}.$$

სტატისტიკური ფიზიკიდან ცნობილია შემდეგი თანადარობა

$$\chi = -\frac{1}{H_z} \frac{\partial}{\partial H_z} \Delta E.$$

ΔE -ს მნიშვნელობის ჩასმვა გვაძლევს

$$\chi_{\text{დია.}} = -\frac{N}{V} \frac{e^2}{6mc^2} \sum \overline{r_i^2}.$$

რაც ემთხვევა დიამაგნიტიზმის კლასიკურ ფორმულას (10.17).

§ 5. თავისუფალი ელემენტარების ორბიტალური დიამაგნიტიზმი (ლანდაუს დიამაგნიტიზმი)

თანახმად კლასიკური მექანიკისა, თავისუფალ ელექტრონთა სისტემას, რომელიც მოთავსებულია გარეგან მაგნიტურ ველში, მაგნიტური ამოფისებლობა არ გააჩნია, $\chi = 0$. ეს გარემოება აიხსნება შემდეგნაირად: მაგნიტური ველი გვაძლევს სიჩქარის მიმართულების ცვლილებას სიჩქარის აბსოლუტური სიდიდის შეუცვლელად, ე. ი. მაგნიტური ველი არ ცვლის ელექტრონების განაწილებას ენერგიების მიხედვით. მეორე მხრივ, მოცემული სისტემის სტატისტიკური ჯამი

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}} \quad (10.19)$$

მაგნიტურ ამთვისებლობასთან დაკავშირებულია შემდეგი ფორმულით:

$$\chi = -\frac{kT}{H} \frac{\partial}{\partial H} \ln Z. \quad (10.20)$$

ვინაიდან, კლასიკური მექანიკის თანახმად, გარეგან მაგნიტურ ველში თავისუფალ ელექტრონთა სისტემის განაწილება ენერგიის მიხედვით არ იცვლება, ე. ი. Z დამოკიდებული არ არის H -ზე, ამიტომ (10.20) ფორმულის მიხედვით ასეთი სისტემის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი $\chi = 0$.

ლანდაუმ შენიშნა, რომ თავისუფალ ელექტრონთა სისტემის ჰამილტონიანი შეიცავს მაგნიტურ ველს. მეორე მხრივ, ჰამილტონიანის საშუალო მნიშვნელობა არის ენერგია, ამიტომ სისტემის კვანტური აღწერისას განაწილება ენერგიის მიხედვით დამოკიდებული იქნება მაგნიტურ ველზე, ე. ი. Z დამოკიდებული იქნება H -ზე, ამიტომ, თანახმად (10.20) დამოკიდებულებისა, $\chi \neq 0$.

მართლაც, დაეწერათ შრედინგერის განტოლება თავისუფალი ელექტრონისათვის, რომელიც იმყოფება გარეგან H მაგნიტურ ველში

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + \frac{eH_z}{2mc} \cdot \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 H_z^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) \psi = E \psi. \quad (10.21)$$

აქ სიმარტივისათვის მაგნიტური ველი აღებულია z ღერძის პარალელურად ($H = H_z$). თუ მოვახდენთ ჩანაცვლებას $\psi(xyz) = \varphi(xy) e^{\frac{ieH_z}{2c} \cdot \frac{xy}{\hbar}}$, $\varphi(x, y, z)$ ფუნქციისათვის, მივიღებთ განტოლებას:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + \frac{eH_z}{mc} \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{eH_z^2}{2mc^2} x^2 \varphi = E \varphi.$$

რადგანაც ამ განტოლებაში y და z კოორდინატები ცხადი სახით არ შედიან, ამ განტოლების გამარტივების მიზნით მოვახდინოთ კიდევ ერთი ჩანაცვლება

$$\varphi(xyz) = \lambda(x) e^{i2\pi(k_y y + k_z z)}.$$

მაშინ $\lambda(x)$ -თვის მიიღება შემდეგი განტოლება.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \lambda}{dx^2} + \left[\frac{1}{2m} (\hbar k_y + H_z \frac{e}{c} x)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right] \lambda = 0. \quad (10.22)$$

ეს უკანასკნელი კი წარმოადგენს შრედინგერის განტოლებას წრფივი

ოსცილატორისათვის, რომელიც ირხევა $x' = -\frac{e\hbar k_y}{eH_z}$ წერტილის ირგვლივ სიხშირით

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \frac{eH_z}{mc} \quad (10.23)$$

(10.22) განტოლების ამოხსნა იძლევა ენერგიის შემდეგ დასაშვებ მნიშვნელობებს:

$$En = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + H_z \frac{\hbar e}{2\pi mc} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (10.24)$$

სადაც n მთელი რიცხვია.

თანახმად (10.24) ფორმულისა, x ღერძის გასწვრივ (მაგნიტური ველის გასწვრივ) ენერგია უწყვეტია, ხოლო მაგნიტური ველის მართობ სიბრტყეში (xy სიბრტყეში) ენერგია იკვანტება. ენერგიის ამ დისკრეტულ მნიშვნელობებს ლანდაუს დონეებს უწოდებენ. თუ გამოვთვლით ლანდაუს დონეების შესაბამის სტატისტიკურ ჯამს (10.19), მივიღებთ Z -ის დამოკიდებულებას H -საგან. მაშინ, თანახმად (10.20) ფორმულისა, გამოვთვლით თავისუფალ ელექტრონთა სისტემისათვის ლანდაუს დიამაგნიტური ამთვისებლობის მნიშვნელობას, რომელიც უდრის ელექტრონული გაზის პარამაგნიტურ ამთვისებლობის ერთ მესამედს და აქვს მინუს ნიშანი.

$$\chi_{\text{დია.}} = -\frac{1}{3} \chi_{\text{პარ.}}$$

§ 6. ფერომაგნეტიზმი (ვეიისის თეორია)

როგორც §1-ში იყო აღნიშნული, ყოველ მაგნიტურ დიპოლზე მოქმედებს სრული ველი, რომელიც უდრის გარეგანი და შინაგანი ველების ჯამს

$$H_{\text{აფ}} = H_{\text{გარ.}} + H_{\text{შინ.}}$$

ვეიისის დაშვების თანახმად, შინაგანი ველი დამაგნიტების ვექტორის პროპორციულია.

$$H_{\text{შინ.}} = \gamma J, \quad (10.25)$$

γ -ს ეწოდება მაგნიტური ველის კონსტანტა.

პარამაგნიტური სხეულებისათვის, როგორც ამას მარტივი გამოთვლები იძლევიან $\gamma = \frac{4\pi}{3}$. ფერომაგნიტური სხეულებისათვის γ ძალზე დიდია,

მაგალითად, რკინისათვის $\gamma = 5000$. ამიტომ, თუ პარამაგნიტური სხეულებისათვის შინაგანი ველის უგულებელყოფა შეიძლება, როგორც ეს

ნაჩვენები იყო § 1-ში, ფერომაგნიტური სხეულების შემთხვევაში შინაგანი ველი არსებითად, მაგალითად, რკინისათვის $H_{\text{ან}} \approx 10^6$ ერსტედს. ეს ველი სამი რიგით აღემატება იმ ველს, რომელსაც ქმნიან მაგნიტური დიპოლები. მართლაც, ელექტროდინამიკიდან ცნობილია, რომ მაგნიტური დიპოლის ველი

$$H \sim \frac{\mu_B}{a^3} \sim 10^3 \text{ ერსტედს,}$$

სადაც μ_B არის ბორის მაგნეტონი. რადგანაც აღებული მაგნიტის გარშემო მდებარე მაგნიტური მომენტების მიერ შექმნილ ველს აქვს სხვადასხვა მიმართულება, ამიტომ ტოლქმედი ველი აღებული დიპოლის მახლობლად იქნება იმავე რიგის, რომელიც მოცემულია ზემოთ. ამრიგად, ფერომაგნიტურ სხეულებში ძალზე დიდი მაგნიტური ველის წარმოშობის მიზეზი უნდა ვეძიოთ სულ სხვა მიმართულებით. მხოლოდ 1928 წელს გაიზენბერგმა გახსნა ამ ველის ფიზიკური არსი. მან გვიჩვენა, რომ ნაწილაკთა სპინებს შორის გაცვლითი ურთიერთქმედების ძალებს (რომელსაც კლასიკური ანალოგი არ გააჩნია და წარმოიშობა მხოლოდ პაულის პრინციპის საფუძველზე), შეუძლიათ ფერომაგნიტურ სხეულებში უზარმაზარი შინაგანი ველის წარმოშობა. მართლაც, თუ ელექტრონის სპინზე მოქმედ ეფექტურ ველს აღვნიშნავთ H_{ef} , მაშინ სპინების ურთიერთქმედების ენერგია ამ ველთან უნდა იყოს იმავე რიგისა, როგორიც სპინების სითბური ენერგია. კიურის ტემპერატურის T_c -ს მახლობლად, მაშასადამე

$$g\beta S H_{\text{ef}} = kT_c,$$

რკინისათვის $T_c = 1000^\circ \text{K}$, $g = 2$ და $S = 1$,

ამიტომ $H_{\text{ef}} \sim \frac{10^{-13}}{2 \cdot 10^{20}} = 5 \cdot 10^6$ ერსტედს.

ვეისის თეორიაში პოსტულირებულია ფერომაგნიტურ სხეულებში ასეთი დიდი შინაგანი ველის არსებობა ფიზიკური დასაბუთების გარეშე. ამიტომ ფერომაგნეტიზმის თეორია არაფრით არ განსხვავდება პარამაგნეტიზმის თეორიისაგან. საკმარისია მხოლოდ H შევცვალოთ სრული ველით $H + \gamma J$ -თ. ამრიგად, ფერომაგნიტური სხეულების დამაგნიტების ვექტორი

$$J = J_0 L \left(\frac{\mu(H + \gamma J)}{kT} \right), \quad (10.26)$$

სადაც L არის ლანჯევენის ფუნქცია $\frac{\mu(H + \gamma J)}{kT}$ არგუმენტი.

პარამაგნიტურ სხეულებში გარეგანი მაგნიტური ველის მოხსნის შემდეგ დამაგნიტება გაქრება, ფერომაგნიტურ სხეულებში კი, როგორც ამას ქვემოთ ვუჩვენებთ, გარკვეული ტემპერატურის ქვემოთ, რომელსაც კიურის ტემპერატურას უწოდებენ, გარეგანი ველის მოხსნის შემდეგ დამაგ-

ნიტება რჩება, რომელსაც სპონტანურ დამაგნიტებას უწოდებენ. სპონტანური დამაგნიტების არსებობა უშუალოდ გამომდინარეობს (10.26) განტოლებიდან. მართლაც, როდესაც $H=0$ გვექნება

$$J = J_0 \left(L \frac{\gamma \mu J}{kT} \right). \quad (10.27)$$

ადგილი საჩვენებელია, რომ ამ განტოლებას აქვს ნულისაგან განსხვავებული ამოხსნა J -ს მიმართ, გარკვეული T_c ტემპერატურის ქვემოთ. ამის დასამტკიცებლად მივმართოთ (10.27) განტოლების გრაფიკულ ამოხსნას. შემოვიტანოთ შემდეგი აღნიშვნები

$$J/J_0 = y \text{ და } x = \frac{\gamma \mu J}{kT} = \frac{\gamma J_0}{kT} \cdot y,$$

მაშინ (10.27) განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$J = L(x),$$

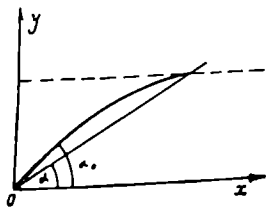
მეორე მხრივ

$$y = \frac{kT}{\gamma \mu J_0} x. \quad (10.28)$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს წრფის განტოლებას, რომლის საკუთხო კოეფიციენტი

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{kT}{\gamma \mu J_0}.$$

ნახ. 87-ზე მოცემულია ლანცევენის $J = L(x)$ ფუნქციისა და ზემოთ აღნიშნული წრფის გრაფიკი. წრფისა და (10.28) მრუდის გადაკვეთის წერტილები წარმოადგენენ (10.27) განტოლების ამოხსნას. როგორც ამ ნახაზიდან ჩანს, ასეთი გადაკვეთის წერტილები ყოველთვის გვაქვს მანამდე, სანამ $\alpha < \alpha_0$, სადაც $\operatorname{tg} \alpha_0$ არის (10.27) მრუდის საკუთხო კოეფიციენტი $x=0$ წერტილში. ამ უკანასკნელის გასაგებად $L(x)$ ფუნქცია გავ-



ნახ. 87.

შალოთ მწყრივად $x=0$ წერტილის მახლობლად. ეს გვაძლევს $y = L(x) \simeq \frac{1}{3} x$

მაშასადამე, საკუთხო კოეფიციენტი $\operatorname{tg} \alpha_0 = \frac{1}{3}$; მეორე მხრივ, წრფის საკუთხო კოეფიციენტი $\operatorname{tg} \alpha = kT / \gamma \mu J_0$, რომელიც ტემპერატურის ფუნქციაა, ამიტომ რომელიმე $T = T_c$ ტემპერატურაზე წრფის საკუთხო კოე-

ფიციენტი გაუტოლდება $L(x)$ ფუნქციის საკუთხო კოეფიციენტს $x=0$ წერტილში, ე. ი.

$$\frac{kT_c}{\gamma\mu J_0} = \frac{1}{3},$$

აქედან

$$T_c = \frac{jJ_0\mu}{8k} = \frac{jN\mu^2}{3k}, \quad (10.29)$$

როდესაც $T > T_c$, მაშინ $\alpha > \alpha_0$, ამიტომ ადგილი არ ექნება წრფის გადაკვეთას $L(x)$ მრუდთან. სხვანაირად რომ ვთქვათ, $T > T_c$ ტემპერატურაზე (10.27) განტოლებას ამოხსნა არა აქვს. ეს ნიშნავს იმას, რომ $T > T_c$ ტემპერატურაზე ადგილი არა აქვს სპონტანურ დამაგნიტებას, ე. ი. $T > T_c$ ტემპერატურაზე ფერომაგნიტური სხეულები იქცევიან ისე, როგორც პარამაგნიტური—მაგნიტური ველის მოხსნისას დამაგნიტება ქრება. ამ გარემოების გამო კიურის ტემპერატურის T_c -ს პოვნა ცდაზე ძალზე მარტივია. ეს ის ტემპერატურაა, როდესაც ფერომაგნიტური სხეულები გადადიან პარამაგნიტურში. განვიხილოთ როგორ იქცევა ფერომაგნიტური სხეული $T \geq T_c$ წერტილის მახლობლად. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, $T > T_c$ ტემპერატურაზე სპონტანური დამაგნიტება არა გვაქვს, ამიტომ, თუ მაგნიტური ველი H დიდი არ არის $T \geq T_c$ ტემპერატურაზე, ლანჯევენის ფუნქციის არგუმენტი მცირეა, რის გამოც ლანჯევენის ფუნქციის დაშლა ამ მცირე არგუმენტის ხარისხებად გვაძლევს (თუ შემოვიხაზდებით დაშლის პირველი წევრით):

$$J = J_0 \frac{\mu(H + \gamma J)}{kT}.$$

აქედან J -ს მიმართ ამოხსნა გვაძლევს:

$$J = \frac{\mu J_0}{3k(T - T_c)} = \frac{\mu^2 N \cdot H}{3k(T - T_c)}.$$

მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტისათვის ვღებულობთ:

$$\chi = \frac{J}{H} = \frac{\mu^2 N}{3k(T - T_c)} = \frac{C}{T - T_c}. \quad (10.30)$$

ეს უკანასკნელი წარმოადგენს კიური-ვეისის ფორმულას (10.6). ზოგიერთი მეტალის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი (10.30) ფორმულით გამოისახება, მაგრამ მათთვის T_c უარყოფითია და ჯამდენიმე ათასის რიგისაა. ასეთი სხეულებისათვის $T \ll T_c$ ტემპერატურაზე მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი თითქმის დამოუკიდებელია ტემპერატურისაგან.

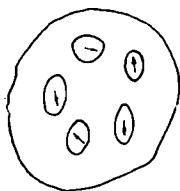
$$\chi \simeq \frac{\mu^2 N}{3kT_0},$$

$$T_0 = -T_c = -\frac{\mu \gamma J_0}{3k} . \quad (10.31)$$

T_c -ს უარყოფითი მნიშვნელობას შეესაბამება γ -ს უარყოფითი მნიშვნელობა. ამ შემთხვევაში შინაგან ველს აქვს არა დამაგნიტების, არამედ განმაგნიტების თვისება, ამიტომ ასეთ სხეულებს ანტიფერომაგნიტურს უწოდებენ.

§ 7. ფერომაგნიტური დომენები

პარამაგნიტური სხეულებისაგან განსხვავებით, ფერომაგნიტურ სხეულებში გვაქვს სპონტანური დამაგნიტება—დამაგნიტება გარეგანი ველის არარსებობის შემთხვევაში. ეს დამაგნიტება შეიძლება ბევრად ნაკლები იყოს, ვიდრე ნაჭერი დამაგნიტება. იმისათვის, რომ მივიღოთ ნაჭერი დამაგნიტება, საჭიროა ნიმუშს მოვლოთ გარეგანი მაგნიტური ველი: თანახმად ცდებისა, ფერომაგნიტურ სხეულებში ნაჭერი დამაგნიტების მისაღებად გვჭირდება სუსტი ველი, რომელიც საკმარისი არ არის ატომთა მაგნიტური მომენტების ველის გასწვრივ ორიენტაციისათვის. ამ მოვ-



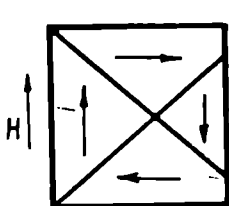
ნახ. 88.

ლენის ასახსნელად ვეისმა დაუშვა, რომ ფერომაგნიტური სხეულები შედგება გარკვეული ზომის უბნებისაგან — დომენებისაგან. ამასთან, თითოეული დომენის შიგნით დამაგნიტება ნაჭერია. მათი დამაგნიტების ვექტორები ორიენტირებულნი არიან (ნახ. 88) ისე, რომ დომენების დამაგნიტების ვექტორების გეომეტრიული ჯამი შეიძლება იყოს ნულის ტოლი (სხეული დამაგნიტებული არ არის) ან განსხვავებული ნულისაგან (სპონტანური დამაგნიტება).

გარეგანი მაგნიტური ველის მოდების დროს დამაგნიტება შეიძლება მოხდეს ორი ერთმანეთისაგან დამოუკიდებელი პროცესის შედეგად: 1) გარეგანი ველის მოქმედების შედეგად დომენების საზღვრების წანაცვლება—დომენის, რომლის დამაგნიტების ვექტორი პარალელურია გარეგანი ველისა, მოცულობა იზრდება იმ მეზობელი დომენის ხარჯზე, რომლის დამაგნიტების ვექტორი არ ემთხვევა გარეგანი ველის მიმართულებას (ნახ. 89 ა) და 2) დომენების დამაგნიტების ვექტორის მობრუნებით გარეგანი ველის გასწვრივ (ნახ. 89 ბ). გამოკვლევები გვიჩვენებენ, რომ სუსტ ველებში დამაგნიტება ძირითადად ხდება დომენის საზღვრების წანაცვლებით, ხოლო ძლიერ ველებში—დამაგნიტების ვექტორების მობრუნებით.

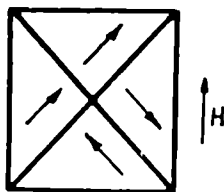
ნახ. 90-ზე ნაჩვენებია დამაგნიტების ტიპური მრუდი. ფერომაგნიტურ სხეულებში დომენური სტრუქტურის არსებობა შეიძლება ვუჩვენოთ დო-

მენების საზღვრების მიკროფოტოგრაფიის გადაღებით. ამ მხრივ ყველაზე თვალსაჩინოა ფხვნილთა სურათების მეთოდი. ამ მეთოდის შინაარსი შემდეგში მდგომარეობს: ძალიან წვრილად დაფხვნილი ფერომაგნიტის ნაწილებისაგან აღგენენ კოლოიდურ ხსნარს. ამ ხსნარის წვეთს ათავსებენ კარგად მოპირალულ ფერომაგნიტის ზედაპირზე. ძალიან წვრილი ფერომაგნიტის ნაწილაკები წარმოადგენენ უპატარა მაგნიტიკებს, რომლებიც



(a)

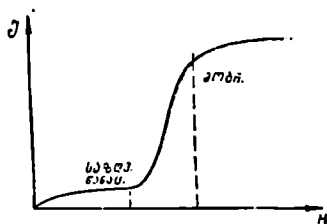
ნახ. 89ა.



(b)

ნახ. 89ბ.

განლაგებული არიან დომენების საზღვრებზე, სადაც გვაქვს ლოკალური ველის მაქსიმალური მნიშვნელობები. მიკროსკოპის ქვეშ დამზერა გვაძლევს ნათლად გამოყოფილ ხაზებს, რომლის გასწვრივ განლაგებული არიან კოლოიდური ხსნარის ნაწილაკები (მცირე მაგნიტიკები). თითოეული ასეთი უბანი არის დომენი, რომლის გეომეტრიული ზომა შეიძლება გაიზომოს. ასეთი გზით მიღებული დომენის ზომა კარგად ემთხვევა თეორიულად გამოთვლილ დომენის ზომას, რომელზედაც ლაპარაკი გვექნება ქვემოთ. დომენების წარმოშობის მიზეზს შეადგენს სხვადასხვა ტიპის ძალების არსებობა ფერომაგნიტურ სხეულებში, რომლებსაც სათანადო წვლილი შეაქვთ ფერომაგნიტური სხეულის ენერგიაში. ესენია: 1. გაცვლითი ურთიერთქმედების ენერგია, 2. ანიზოტროპიის ენერგია და 2. მაგნიტური ენერგია.

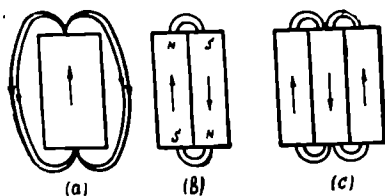


ნახ. 90.

წარმოვიდგინოთ, რომ ფერომაგნიტური სხეული შედგება მხოლოდ ერთი დომენისაგან, რომლის დამაგნიტების ვექტორი ნაჩვენებია ნახ. 91ა-ზე. ფერომაგნიტის ასეთ მდგომარეობას ეთანადება მაქსიმალური მაგნიტური ენერგია.

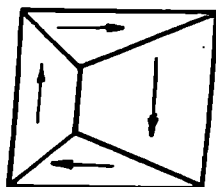
თუ სხეულს წარმოვიდგენთ ორი დომენისაგან შემდგარს, რომელთა დამაგნიტების ვექტორებს ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულება

აქეთ (ნახ. 91B), მაშინ ასეთ სტრუქტურას შეესაბამება ორჯერ ნაკლები მაგნიტური ენერგია, ნახ. 91C-ზე ნაჩვენებ სტრუქტურას—სამჯერ ნაკლები და ა. შ. ამრიგად, მაგნიტური ენერგიის თვალსაზრისით, ხელსაყრელია სხეულის დაყოფა რაც შეიძლება მეტ რიცხვ-დომენებად, კერძოდ—ატომის ზომაზე დაყოფა. მაშინ, ცხადია, თვით დომენის ცნებას აზრი დაეკარგებოდა. ბუნებრივია, უნდა არსებობდეს მეორე მიზეზი, რომელიც მოქმედებს საწინააღმდეგო მიმართულებით. ასეთ მიზეზს შეადგენს სპინებს (მაგნიტურ დომენებს) შორის გაცვლითი ურთიერთქმედება. კვანტური



ნახ. 91 a, b, c.

შეჟანაიდან ცნობილია, რომ ორ სპინს შორის გაცვლითი ურთიერთქმედება (გაცვლითი ძალები) ხელს უწყობენ სპინების პარალელურ ორიენტაციას. ამიტომ, როდესაც დამაგნიტების ვექტორის ერთი მიმართულებიდან გადავდივართ საწინააღმდეგო მიმართულებაზე, უნდა დაიხარჯოს გარკვეული მუშაობა გაცვლითი ძალების საწინააღმდეგოდ. ეს ენერგია კრისტალში გადადის ზედაპირული ენერგიის სახით, რომელიც შეესაბამება ორი დომენის შეხების ზედაპირს. ამრიგად, სხეულის მეტ რიცხვ-დომენებად დაყოფისას მაგნიტური ენერგია მცირდება, სამაგიეროდ იზრდება დომენების შეხების ზედაპირი ანდა ზე-



ნახ. 92.

დაპირული ენერგია. ეს ორი ერთმანეთის საწინააღმდეგოდ მიმართული პროცესთა კონკურენცია გვაძლევს გარკვეული ზომის დომენებად დაყოფას. მართლაც, როდესაც N დომენიდან $N + 1$ დომენად დაყოფის დროს მაგნიტური ენერგიის შემცირება გაუტოლდება ახლად შექმნილი ზედაპირის ზედაპირულ ენერგიას, შემდგომი დაყოფა დომენებად შეწყდება. იმ პირობიდან განისაზღვრება დომენის გეომეტრიული ზომა და ამავე დროს დომენის წარმოშობის ენერგია.

ასეთნაირად თეორიულად გამოთვლილი დომენის ზომა კარგად ემთხვევა ფხვნილთა მეთოდით მიღებულ შედეგს. შესაძლებელია დომენის სხვანაირი სტრუქტურა წარმოვიდგინოთ, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 92-ზე. აქ ორ დომენს აქვს დამაგნიტების ვექტორი, მიმართული ვერტიკალურად, მათ

ვერტიკალურ ღომენებს უწოდებენ. ორ ღომენს აქვს დამაგნიტების ვექტორი, მიმართული ჰორიზონტალურად. მათ ჩამკეტ ღომენებს უწოდებენ. ჩამკეტი ღომენების დამაგნიტების ვექტორები 45° კუთხით არიან მიწართული მათი გამყოფი ზედაპირის მიმართ. ამიტომ ერთი არიდან მეორეში გადასვლისას დამაგნიტების ვექტორების მხები (ასევე ნორმალური მდგენელები) არ იცვლებიან. ეს იმას ნიშნავს, რომ მაგნიტური ძალები ღომენების შიგნით იკვრებიან, ამიტომ ასეთ სტრუქტურას არ გააჩნია მაგნიტური პოლუსები. მაშასადამე, ასეთ სტრუქტურას ეთანადება ნულის ტოლი მაგნიტური ენერგია. ამ შემთხვევაში ღომენებად დაყოფის მიზეზი გაცვლითი ძალებისა და ანიზოტროპიის ძალების (ენერგიის) კონკურენციაა. ცდები გვიჩვენებენ, რომ ნაჯერი დამაგნიტების მისაღებად საჭირო ენერგია სხვადასხვა მიმართულებით სხვადასხვაა.

ერთი გარკვეული მიმართულებით ნაჯერი დამაგნიტების მისაღებად საჭიროა მინიმალური ენერგია. ასეთ მიმართულებას უწოდებენ ადვილად დამაგნიტების მიმართულებას (ლერძს). სხვა მიმართულებით ნაჯერი დამაგნიტების მისაღებად კი საჭიროა მეტი ენერგია. ამ მიმართულებას (ლერძს) ეწოდება ძნელად დამაგნიტების მიმართულება. ამ ორი მიმართულებით დამაგნიტებისათვის საჭირო ენერგიათა სხვაობა, რომელიც ეთანადება ნაჯერ დამაგნიტებას, ეწოდება ანიზოტროპიის ენერგია, ანდა ანიზოტროპიის ძალების შესაბამისი ენერგია. ცდები გვიჩვენებენ, რომ, თუ ნახ. 96-ზე წარმოდგენილი სტრუქტურის შემთხვევაში ვერტიკალურ ღომენს ადვილად დამაგნიტების მიმართულება ეთანადება, მაშინ ჩამკეტ ღომენს ექნება ძნელად დამაგნიტების მიმართულება. მაშასადამე, ნახ. 95-ზე ნაჩვენები სტრუქტურის შემთხვევაში ღომენებად დაყოფის მიზეზს შეადგენს ზედაპირული ენერგიისა (გაცვლითი ძალები) და ანიზოტროპიის ენერგიათა (ანიზოტროპიის ძალების) კონკურენცია. შესაძლებელია აგრეთვე ღომენების კიდევ სხვა სტრუქტურები, რომელთა გარჩევაზე ჩვენ აქ არ შევჩერდებით.

§ 8. მაგნიტური რეზონანსის პრინციპი

განვიხილოთ ორი შემთხვევა: ა) ელექტრონულ გარსს აქვს მაგნიტური მომენტი (პარამაგნიტური სხეულები) და ბ) ელექტრონულ გარსს არ გააჩნია მაგნიტური მომენტი. სამაგიეროდ ბირთვს აქვს მაგნიტური მომენტი (დიამაგნიტური სხეულები). პირველ შემთხვევაში საქმე გვაქვს პარამაგნიტურ რეზონანსთან (მპრ), მეორე შემთხვევაში—ბირთვულ მაგნიტურ რეზონანსთან (ბმრ).

ვთქვათ ატომს გააჩნია მაგნიტური მომენტი $j(j = L + S$ ორბიტალური და სპინომომენტების ჯამი). დავუშვათ, რომ ნიშნში მოთავსებულია გარეგან მაგნიტურ ველში, რომელიც OZ ღერძის პარალელურია, მაშინ, თანახმად კვანტური მექანიკისა, მაგნიტურ მომენტს ამ ღერძის მიმართ ექნება

დისკრეტული ორიენტაციები, რომლებსაც ეთანადებიან OZ ღერძზე მომენტის გეგმილის შემდეგი მნიშვნელობები

$$\begin{aligned} j_z &= m\hbar \\ -j < m < j, \end{aligned} \quad (10.32)$$

სადაც m მაგნიტური კვანტური რიცხვია, რომელიც ლებულობს $2j+1$ დისკრეტულ მნიშვნელობებს.

როდესაც მაგნიტური ველი არა გვაქვს, მაშინ OZ ღერძის მიმართ j ვექტორის ყველა ორიენტაცია ერთნაირი ალბათობისაა. კვანტური მექანიკის ენით რომ ვთქვათ, ატომის j მდგომარეობა არის $2j+1$ ჯერადად გადაგვარებული. გარეგანი მაგნიტური ველი ამ გადაგვარებას მოხსნის; რის შედეგად მიიღება $2j+1$ დისკრეტული დონეები, რომლებსაც ზეემანის დონეებს (ზეემანის გახლეჩვას) უწოდებენ. ზეემანის დონეების შესაბამისი ენერგია მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$\begin{aligned} E_m &= mg\beta H \\ -j < m < j \end{aligned} \quad (10.33)$$

სადაც

$$\beta = \frac{e\hbar}{2mc} \text{ არის ბორის მაგნეტონი.}$$

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \text{ — ლანდეს მამრავლი.}$$

ზეემანის მეზობელ დონეებს შორის მანძილი

$$E_{m+1} - E_m = g\beta H$$

არ არის დამოკიდებული m -ზე, ე. ი. ზეემანის დონეები ტოლი მანძილებით არიან დაშორებული ერთმანეთისაგან.

შემოვიტანოთ სიხშირე ω_0 შემდეგი სახით

$$\hbar\omega_0 = g\beta H,$$

აქედან

$$\omega_0 = \frac{g\beta}{\hbar} H = \gamma H, \quad (10.34)$$

სადაც $\gamma = \frac{g\beta}{\hbar} = \frac{g\beta j}{\hbar j} = \frac{\mu}{\hbar j}$ არის მაგნიტური მომენტის (μ) ფარდობა

მექანიკურ მომენტთან ($\hbar j$), მას გირომაგნიტურ ფარდობას უწოდებენ. ბორის მაგნეტონი მნიშვნელში შეიცავს მასას, ამიტომ ბირთვის შემთხვევაში იგი დაახლოებით 1000-ჯერ ნაკლებია, ვიდრე გარსისათვის (ელექტრონისათვის), შესაბამისად ამისა ბირთვისათვის γ სამი რიგით ნაკლებია, ვიდრე გარსისათვის

$$\gamma_{\text{ბიბ}} \sim 10^4$$

$$\gamma_{\text{ბარ}} \sim 10^7$$

$H=300$ ერსტელის შემთხვევაში

$$\frac{\omega_0}{2\pi} \sim 10^7 \text{—ბირთვისათვის}$$

$$\frac{\omega_0}{2\pi} \sim 10^{10} \text{—გარსისათვის}$$

როგორც ვხედავთ, ბირთვის შემთხვევაში სიხშირე ω_0 რადიოტალღების არეშია, გარსისათვის კი—მიკროტალღების (სანტიმეტრიანი ტალღების) არეშია.

მაგნიტური ველის მართობულად მოვლით წრფივად დაპოლარებული ცვალებადი მაგნიტური ველი $H_x = H_1 \cos \omega t$, სადაც $H_1 \ll H$. გავარჩიოთ რა ცვლილებას გამოიწვევს ასეთი ცვალებადი მაგნიტური ველის დამატება. უპირველეს ყოვლისა, განვიხილოთ კლასიკური სურათი. ელექტროდინამიკიდან ცნობილია, რომ მაგნიტურ მომენტზე μ (ანდა j) მოქმედებს მბრუნებელი მომენტი $\mu \times H$, რომელიც გვაძლევს μ ვექტორის პრეცესიას H -ის გარშემო $\omega_0 = \gamma H$ სიხშირით. იმისათვის, რომ გავარკვიოთ, თუ რა გავლენას ახდენს აღნიშნულ პრეცესიაზე წრფივად დაპოლარებული H_x ველი, უკანასკნელი წარმოვადგინოთ როგორც წრიულად დაპოლარებული ორი ველის ჯამი, რომლებიც ბრუნავენ ω სიხშირით ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულებით. ჯერ განვიხილოთ წრიულად დაპოლარებული ველი, რომელიც ბრუნავს μ ვექტორის პრეცესიის საწინააღმდეგო მიმართულებით. ამასთან, დავუშვათ, რომ $\omega \neq \omega_0$. ამ შემთხვევაში დროის რომელიმე მომენტში ეს ორი რხევა აღმოჩნდება ერთნაირ ფაზაში, რადგანაც $\omega \neq \omega_0$ რომელიმე მომენტში მათი ფაზები განსხვავებული გახდება π -ით, შემდეგ მომენტში ერთნაირ ფაზებში აღმოჩნდება და ა. შ. ამრიგად, ეს რხევები ერთ მომენტში ერთმანეთს გააძლიერებენ, მეორე მომენტში ერთმანეთს შეაღუსტებენ და ა. შ. და რადგანაც აღნიშნული პრეცესია მიმდინარეობს ძალიან დიდი სიჩქარით, საშუალო ეფექტი ნულის ტოლი იქნება. იგივე შედეგი მიიღება იმ შემთხვევაში, როდესაც ω_0 სიხშირით პრეცესირებად μ ვექტორთან იკრიბება იმავე მიმართულებით მბრუნავი წრიულად დაპოლარებული ველი. როდესაც $\omega = \omega_0$, მაშინ პრეცესიის საწინააღმდეგო მიმართულებით მბრუნავი წრიული ველი ეფექტს არ იძლევა. სამაგიეროდ, პრეცესიის მიმართულებით მბრუნავი წრიული ველი ყოველთვის ფაზაში იქნება. ამიტომ, თუ რომელიმე მომენტში ისინი ერთმანეთს აძლიერებენ (ე. ი. იმყოფებიან ერთნაირ ფაზებში), შემდეგშიაც ეს მდგომარეობა უცვლელი დარჩება. შედეგად ამისა მიიღება μ მომენტის პერეორიენტაცია, რომელსაც ეთანადება ენერგიის შთანთქმა ცვალებადი მაგნიტური ველის წყაროდან. ამ შთანთქმას ეწოდება რეზონანსული შთანთქმა.

კვანტური სურათი უფრო მარტივია. კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ ცვალებადი ელექტრომაგნიტური ველი (ამ შემთხვევაში წრიულად დაპოლარებული ველი $H_x = H_1 \cos \omega t$) შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც 2π ენერგიის კვანტების ერთობლიობა. როდესაც კვანტის ენერგია გაუტოლდება ზეემანის მეზობელ დონეებს შორის მანძილს, ე. ი. $\hbar\omega = \hbar\omega_0$ ანდა $\omega = \omega_0$, ადგილი ექნება ზეემანის დონეებს შორის გადასვლებს (შთანთქმა ან გამოსხივება). ეს გადასვლები გამოწვეულია მაგნიტური მომენტისა და ცვალებადი H_x ველის ურთიერთქმედებით—მაგნიტურ-დიპოლური გადასვლები, რომელიც ემორჩილება შერჩევის წესს $\Delta m = 0, \pm 1$, ჩვენს შემთხვევაში გვაძლევს გადასვლებს ზეემანის მეზობელ დონეებს შორის $m \rightarrow m+1$ და $m \rightarrow m-1$.

დიპოლის მაგნიტური ენერგია გარეგან H_x ველში არის— μH_x . ეს უკანასკნელი შეიძლება განვიხილოთ როგორც შემფოთების ენერგია, რომელიც პასუხისმგებელია ზემოთ აღნიშნული გადასვლებისა ზეემანის მეზობელ დონეებს შორის. გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ გადასვლის მატრიცული ელემენტები ნულისაგან განსხვავებულია ცვალებადი ველის იმ კომპონენტის მიმართ, რომელიც მართობია H ველისა და გვაძლევს ზეემანის გახლეჩვას. სწორედ ამის გამო ავიღეთ ცვალებადი მაგნიტური ველი H_x , რომელიც H -ის მართობია.

რეზონანსულ ცდაზე იზომება კოჰას ვარგისიანობა ანდა Q ფაქტორი, რომელიც განისაზღვრება შემდეგნაირად:

$$Q = 2\pi \frac{\text{წრელში გადაცემული ენერგია}}{\text{ერთი ციკლის დროს შთანთქმული ენერგია}}$$

რეზონანსის მომენტში შთანთქმა იზრდება, ამიტომ Q ფაქტორი მკვეთრად ეცემა. ეს უკანასკნელი მიმდებ ნაწილში გამოიწვევს ძაბვის სათანადო ცვლილებას

$$\Delta \nu \sim \Delta \chi Q,$$

სადაც χ არის ნიშნის მაგნიტური ამთვისებლობის კოეფიციენტი. ეს სიდიდე შეიძლება წარმოდგენილ იქნეს შემდეგი სახით

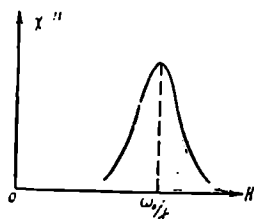
$$\chi = \chi' - t\chi'',$$

სადაც χ' განსაზღვრავს დისპერსიას, χ'' — შთანთქმას. ცდაზე იზომება χ' -ის დამოკიდებულება H -გან. ამ დამოკიდებულებას აქვს მკაფიო მაქსიმუმი რეზონანსის მომენტში $\omega = \omega_0$ (ნახ. 93).

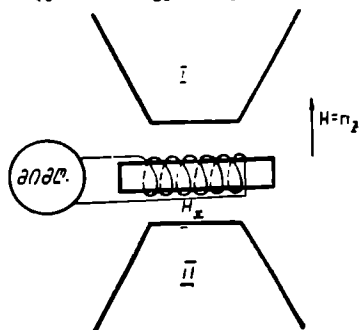
რეზონანსული დანადგარის სქემა მოცემულია ნახ. 94-ზე. I და II არის ძლიერი ელექტრომაგნიტის პოლუსები, რომლებიც ქმნიან ძლიერ მაგნიტურ ველს $H = H_z$. ელექტრომაგნიტის პოლუსებს შორის მოთავსებულია გამოსარკვევი ნიშნუმი, რომელზედაც დახვეულია მავთული, რომელშიაც გადის ω სიხშირის ცვალებადი დენი. ეს უკანასკნელი წარმო-

შობს ცვალებად მაგნიტურ ველს H_x , რომელიც მართობია H_z ველისა. ზოგჯერ არ სრულდება რეზონანსის პირობა ($\omega = \omega_0$), მაშინ აღვნიშნავთ არა აქვს რეზონანსულ შთანთქმას, თუმცა შესაძლებელია შთანთქმა გამოწვეული იყოს სხვა მიზეზებითაც. ცდაზე რეზონანსის მიღწევისათვის უფრო ხელსაყრელია ვცვალოთ H_z (მაგნიტის პოლუსების გაწევის გზით), ე. ი. ω_0 და არაცვალებადი ველის სიხშირე ω , ვინაიდან ამ უკანასკნელის ყოველი ცვლილება დაკავშირებულია მიმღების სათანადო გადაკეთებასთან, რაც მიზანშეწონილი არ არის.

ვთქვათ, რეზონანსული ცდა ტარდება ბირთვების ერთობლიობაზე



ნახ. 93.



ნახ. 94.

(ბმრ). თუ ბირთვის მომენტი $J = \frac{1}{2}$, მაშინ $H = H_z$ ველში მიიღება

ზეემანის ორი დონე $2j + 1 = 2$. ერთი ეთანადება სპინს, რომელიც პარალელურია H -ის, მეორე — H -ის ანტიპარალელურ სპინს. მოვდეთ რეზონანსული სიხშირის ცვალებადი ველი H_x -ის მართობულად. ეს უკანასკნელი აღნიშნულ დონეებს შორის გამოიწვევს გადასვლებს და მიიღება ერთი სპექტრული ხაზი, რომელსაც გარკვეული სიგანე ექნება (ნახ. 93). ეს გარემოება აიხსნება შემდეგნაირად: ყოველ ბირთვზე მოქმედებს სრული ველი გარეგანი H , მიმატებული ლოკალური $H_{\text{ლოკ.}} \sim \frac{\mu}{a^3}$, რომელიც

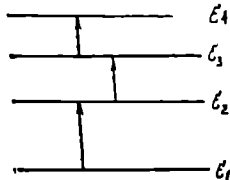
იქმნება მეზობელი ბირთვების მიერ. H -ის მიმართ სხვადასხვა ბირთვების მიერ შექმნილ ველს აქვს სხვადასხვა ორიენტაცია, ამიტომ $H + H_{\text{ლოკ.}}$ სიდიდე იცვლება ერთი ბირთვიდან მეორეზე გადასვლის დროს და რადგანაც ცდას ვაწარმოებთ არა ერთ ბირთვზე, არამედ ბირთვების სისტემაზე, რეზონანსის პირობა იქნება

$$H + H_{\text{ლოკ.}} = \frac{\omega_0}{\gamma}. \quad (10.35)$$

ამრიგად რეზონანსული მრუდის განრთხმა იქნება $H_{\text{ლყ.}}-ს$ რიგის. $H_{\text{ლყ.}} = \frac{\mu}{a^3} \sim 5$ ერსტედი, ცდაც ამ შედეგს ადასტურებს.

ვთქვათ ბირთვის მომენტი $J > \frac{1}{2}$, ამ დროს რეზონანსულ მრუდზე წარმოიშობა წვრილი სტრუქტურა. მისი წარმოშობის მიზეზი შემდეგია: კვანტური მექანიკიდან ცნობილია, რომ როდესაც ბირთვის სპინი $> \frac{1}{2}$,

ბირთვს გააჩნია კვადრუპოლური მომენტი. კვადრუპოლური მომენტი იმყოფება მესერის იონების მიერ შექმნილ ერთგვაროვან ელექტრულ ველში. ეს უკანასკნელი იწვევს ბირთვის განხლეჩვას (შტარკის ეფექტი). თუმცა ბირთვის სპინზე შტარკ-ეფექტი მცირეა, საბოლოოდ გარკვეულ გავლენას ახდენს ზეემანის ღონეებზე—ზეემანის ღონეები ხდება არაეკვიდისტანტური.



ნახ. 95.

თუ $J = \frac{3}{2}$, მიიღება $2J + 1 = 4$ ზეემანის

ღონეები, რომლებიც ერთიმეორისაგან დაშორებული არიან სხვადასხვა მანძილებით. მოვლთ ახლა ცვალებადი H_z ველი. მივიღებთ

ზეემანის ღონეებს შორის გადასვლებს. ამ დროს მიიღება სამი სპექტრული ხაზი (ნახ. 95). ამრიგად, ხაზების რიცხვი საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ ბირთვის სპინი. გარდა ამისა, სპექტრულ ხაზებს შორის მანძილი საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ კვადრუპოლური ბმის კონსტანტა.

პირველი რეზონანსული ცდა ელექტრონულ გარსზე (მკრ) ჩატარდა 1944 წელს ზაგოისკის მიერ, ხოლო მაგნიტური რეზონანსი ბირთვზე (ბმრ)—პერსელისა და ბლოხის მიერ 1946 წელს.

§ 9. სპინ-შეხვედრული და სპინ-სპინური ჩაღმტყნების დრო

განვიხილოთ დიამაგნიტური ნივთიერება. გამოსაკვლევი ობიექტი შეიძლება წარმოვიდგინოთ როგორც ერთობლიობა ორი ქვესისტემისა: პირველი—ბირთვული სპინ-სისტემა და მეორე—სისტემა, რომელსაც ადგენს დანარჩენი თავისუფლების ხარისხი, ჩვეულებრივ მას უწოდებენ მესერს (მესერის რჩევები). ვთქვათ ბირთვის მომენტი $J = \frac{1}{2}$, მაშინ გარეგან

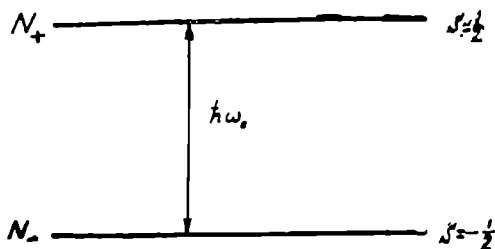
მაგნიტურ ველში მიიღება ზეემანის ორი ღონე (ნახ. 96). ამ ღონეებს შორის მანძილი უდრის $2\mu H$. თუ ასეთი სისტემა იმყოფება (სპინ-სისტემა) მესერთან სითბურ წონასწორობაში, მაშინ სპინ-სისტემის ტემპერა-

ტურა (T_s) უდრის მესერის ტემპერატურას (T) და აღნიშნულ ღონეებზე დასახლება მოიცემა ბოლცმანის კანონით

$$\frac{N_+}{N_-} = e^{-\frac{2\mu H}{kT_s}} \quad (T_s = T), \quad (10.36)$$

სადაც N_+ არის ბირთვების რიცხვი სპინით $J_z = +\frac{1}{2}$ და N_- ბირთვების რიცხვი სპინით $J_z = -\frac{1}{2}$.

მოვლოთ მოცემულ სისტემას რეზონანსული სიხშირის ცვალებადი მაგნიტური ველი, მაშინ ზემოაღნიშნული წონასწორობა სპინსისტემისა



ნახ. 96.

მესერთან დაირღვევა. მაგრამ, ბოლცმანის კანონის თანახმად, ქვედა ღონე უფრო მეტად არის დასახლებული, ვიდრე ზედა ღონე, ამიტომ გადასვლები ქვევიდან ზევით მეტი იქნება, ვიდრე შებრუნებული გადასვლები, ე. ი. $N_+ - N_-$ შემცირდება, როდესაც $N_+ - N_- = 0$ შთანთქმა შეწყდება. თანახმად (10.36) დამოკიდებულებისა, $N_+ = N_-$ ეკვივალენტურია სპინ-ტემპერატურის გადიდებისა $T_s \rightarrow \infty$, დაუშვათ, რომ $N_+ \simeq N_-$. მიღწევის შემდეგ მყისვე გამოვრთეთ ცვალებადი მაგნიტური ველი. მაშინ სპინ-სისტემისა და მესერის ტემპერატურების გათანაბრება მოხდება რაღაც დროის ინტერვალში. სპინ-ტემპერატურისა და მესერის ტემპერატურის გათანაბრება კი ეკვივალენტურია. ისევ აღვადგინოთ აღრინდელი ბოლცმანის განაწილება (10.36). გამოვარკვიოთ, თუ რა კანონს ემორჩილება ბოლცმანის პირვანდელი მდგომარეობის აღდგენა. გარეგანი ცვალებადი ველით $H_x = H_1 \cos \omega t$ გამოწვეული გადასვლები ქვევიდან ზევით (შთანთქმა) უდრის გადასვლებს ზევიდან ქვევით (გამოსხივება)—ეს არის იძულებითი (სტიმულირებული) გადასვლები, გარდა ამისა გვაქვს აგრეთვე სპონტანური გადასვლები, რომელიც გამოწვეულია სპინ-სისტემისა და მესერის ურთიერთქმედებით. სპონტანური გადასვლების ალბათობა ზევიდან ქვევით (გამოს-

ხივება) და ქვევიდან ზევით (შთანთქმა) ერთნაირი არ არის. ზევიდან ქვევით გადასვლის ალბათობა მეტია, ვიდრე შებრუნებული გადასვლის ალბათობა. ამის გამო გარკვეული დროის განმავლობაში ისევ აღდგება ბოლცმანის წონასწორული დასახლება დონეებს შორის. ქვევიდან ზევით გადასვლის ალბათობა აღენიშნოთ W_{+-} -თ. ხოლო გადასვლის ალბათობა ზევიდან ქვევით W_{-+} -თ, მაშინ სპინ-სისტემისა და მესერის წონასწორობის დროს ორივე მიმართულებით გადასვლების რიცხვი ერთმანეთის ტოლი იქნება, ე. ი. $W_{+-} \cdot N_{+} = W_{-+} \cdot N_{-}$. მცირე მტანჯ, მაღალ ტემპერატურაზე $\mu H / kT \ll 1$ გვექნება

$$\frac{N_{-}}{N_{+}} = e^{\frac{2\mu H}{kT}} \simeq 1 + \frac{2\mu H}{kT} \quad (T = T_s).$$

ამ ორი განტოლების ამოხსნა გვაძლევს

$$\begin{aligned} W_{-+} &= W \left(1 + \frac{\mu H}{kT} \right), \\ W_{+-} &= W \left(1 - \frac{\mu H}{kT} \right), \end{aligned} \quad (10.37)$$

სადაც

$$W = \frac{W_{+-} + W_{-+}}{2}.$$

რადგანაც $W_{-+} > W_{+-}$ სპინ-მესერის ურთიერთქმედების გამო აღდგება ბოლცმანის ძველი წონასწორული განაწილება. წონასწორობისაკენ მისწრაფვის კანონი მოინახება შემდეგნაირად, გარეგანი ველის მოხსნის შემდეგ რომელიმე t მომენტში დასახლებათა განსხვავება აღენიშნოთ $n = N_{-} - N_{+}$ -ით. მაშინ n -ის ცვლილება დროით მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$\frac{dn}{dt} = 2(N_{+}W_{+-} - N_{-}W_{-+}). \quad (10.38)$$

აქ მამრავლი 2 ჩნდება იმის გამო, რომ ყოველ გადასვლას ზევიდან ქვევით ეთანადება N_{-} -ის გადიდება ერთით და N_{+} -ის შემცირება ერთით, ე. ი. $N_{-} - N_{+}$ იცვლება ორით.

თუ (10.38) განტოლებაში ჩავსვამთ N_{-+} და N_{+-} -ის მნიშვნელობებს, (10.37) ფორმულიდან მივიღებთ.

$$\frac{dn}{dt} = 2W(n_0 - n), \quad (10.39)$$

სადაც n_0 არის n -ის მნიშვნელობა წონასწორობის მდგომარეობაში. (10.38) განტოლების ამოხსნა შეადგენს

$$n_0 - n = (n_0 - n_a)e^{-2\omega t} \quad (10.40)$$

სადაც n_a არის n -ის მნიშვნელობა $t=0$ მომენტში.

ამრიგად, სპინ-სისტემისა და მესერის ურთიერთქმედების შედეგად სისტემა მიისწრაფის წონასწორობისაკენ ექსპონენციალური კანონით. ამ პროცესის სიჩქარე ხასიათდება

$$T_1 = \frac{1}{2W} \quad (10.41)$$

სიდიდით, რომელსაც ეწოდება სპინ-მესერული რელაქსაციის დრო.

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, მეზობელი ბირთვების ლოკალური ველის გათვალისწინების შემთხვევაში რეზონანსის პირობას შეადგენს

$$H + H_{\text{loc}} = \frac{\omega_0}{\gamma}.$$

ამ თანაფარდობის გამო ლარმორის სიხშირე ω_0 შეიცვლება შემდეგ ფარგლებში

$$\delta\omega_0 = \gamma H_{\text{loc}} \sim \frac{\mu^2}{a^3} \sim 10^4 \text{ წმ}^{-1}.$$

თუ ლარმორის პრეცესიის სიხშირე ორი სპინისა განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან $\delta\omega_0$ სიდიდით, მაშინ რომელიმე მომენტში ისინი ერთნაირ ფაზებში აღმოჩნდებიან. შემდეგ მომენტში ფაზებით განსხვავება იქნება π .

ისევე ფაზებში აღმოჩნდებიან $T_2 \sim \frac{1}{\delta\omega_0} \sim 10^{-4}$ წმ განმავლობაში (ფაზური მახსოვრობა). სპინებს შორის ურთიერთქმედება არის სპინებს შორის ენერგიის გაცვლის მიზეზი. რადგანაც სპინების ფაზის ცვლილება (ფაზური მახსოვრობა) ხდება $\sim \frac{1}{\delta\omega_0}$ დროის განმავლობაში. სხვანაირად.

რომ ვთქვათ $\frac{1}{\delta\omega_0}$ წარმოადგენს სპინური მდგომარეობის ხანგრძლივობას.

და ეწოდება სპინ-სპინური რელაქსაციის დრო. ეს უკანასკნელი შეიძლება აგრეთვე განვსაზღვროთ როგორც დროის ის ინტეგრალი, რომლის განმავლობაში სპინ-სისტემის ურთიერთქმედების გამო დამყარდება წონასწორობა სპინ-სისტემაში. $\frac{1}{T_2}$ განსაზღვრავს რეზონანსული მრუდის.

სიგანეს წმ^{-1} ერთეულებში. ხოლო $\frac{1}{\gamma T_2}$ — რეზონანსული მრუდის სიგანეს, ერსტელებში.

თ ა ვ ი XI

კონტაქტური მოვლენები

ნახევარგამტარში კონტაქტური მოვლენების შესწავლას ფუნდამენტური მნიშვნელობა აქვს, რადგანაც მთელ რიგ ნახევარგამტარულ ხელსაწყოებში გამოყენებულია ის ფიზიკური მოვლენები, რომლებიც მიმდინარეობენ სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობის ნახევარგამტართა კონტაქტურ ფენაში.

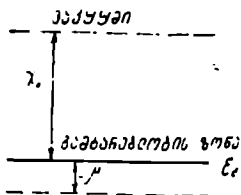
ჯერ კიდევ გასული საუკუნის 70-იან წლებში შემჩნეული იყო, რომ მეტალის კონტაქტს ნახევარგამტართან ცალმხრივი გამტარობა აქვს. ამ პრინციპზე აგებულ იქნა კრისტალური დეტექტორები, რომლებმაც ფართო გამოყენება პოვეს რადიოტექნიკის განვითარების პირველ ეტაპზე. შემდეგში კრისტალური დეტექტორები გამოძევებულ იქნა ვაკუუმური გამასწორებლებით. კონტაქტური მოვლენების დეტალურმა შესწავლამ გვიჩვენა, რომ საუკეთესო გასწორების თვისება გააჩნია ორი სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობის ნახევარგამტართა კონტაქტს. გარდა ამისა მათ აქვთ მრავალი უპირატესობა ვაკუუმურ გამასწორებლებთან შედარებით, ამიტომ ვაკუუმური გამასწორებლები დღითიდღე გამოდიან ხმარებიდან. კონტაქტურ მოვლენებზე აგრეთვე აგებულია კრისტალური ტრანზისტორების (ელექტრომაგნიტური სიგნალების გამაძლიერებლის), ფოტოელემენტების (მზის ენერგიის უშუალოდ ელექტრული გარდაქმნელის) და სხვათა მუშაობის პრინციპები. კონტაქტური მოვლენების ასეთი დიდი მნიშვნელობის გამო დეტალურად შევჩერდებით იმ მოვლენების განხილვაზე, რომლებიც მიმდინარეობენ კონტაქტურ ფენებში.

§ 1. მეტალის კონტაქტი ნახევარგამტართან

კრისტალის შიგნით თავისუფალი ელექტრონის ენერგია ნაკლებია, ვიდრე გარეთ—ვაკუუმში, ამიტომ კრისტალიდან ვაკუუმში ელექტრონის გამოსაყვანად საჭიროა გარკვეული ენერგიის დახარჯვა, რომელსაც გამოსვლის მუშაობას უწოდებენ. ცხადია, რომ, რაც უფრო მეტი ენერგია აქვს

ელექტრონის კრისტალის შიგნით, მით უფრო ნაკლები ენერგია დაგვეკრება მის გამოსაყვანად კრისტალიდან ვაკუუმში. ვინაიდან კრისტალში ელექტრონები განაწილებული არიან კვანტურ დონეებზე ენერგიის მიხედვით, ამიტომ თითოეული ელექტრონი უნდა დახასიათდეს სათანადო გამოსვლის მუშაობით, რაც მეტად მოუხერხებელია. პირობით ვუწოდოთ გამოსვლის მუშაობა ენერგიის იმ რაოდენობას, რომელიც საჭიროა გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირზე მდებარე ელექტრონის გადასაყვანად ვაკუუმში. იგი აღნიშნათ X_0 -ით (ნახ. 97). ჯერ განვიხილოთ არაგადაგვარებული ელექტრონული გაზი ნახევარგამტარებში. ამ შემთხვევაში ელექტრონები ენერგიის მიხედვით განაწილებული არიან ბოლცმანის კანონით:

$$f_e(E) = e^{-\frac{(E-\mu)}{kT}} = e^{-\left(\frac{m\phi^2}{2} - \mu\right)/kT} \quad (11.1)$$



ნახ. 97.

განვიხილოთ კრისტალის ზედაპირი, რომელიც მართობია x ღერძისა და განვსაზღვროთ ელექტრონების ის რიცხვი, რომლებიც გამოვლენ აღნიშნული ზედაპირიდან ვაკუუმში დროის ერთეულში. ცხადია, ყველა ის ელექტრონები, რომელთა კინეტიკური ენერგია

$$\frac{mv_x^2}{2} \geq \chi_0, \quad (11.2)$$

გამოვლენ კრისტალიდან ვაკუუმში x ღერძის მიმართულებით, როგორც არ უნდა ჰქონდეთ მათ სიჩქარის v_y და v_z კომპონენტები.

ელექტრონების საერთო რიცხვი, რომელიც მოთავსებულია ფაზური სივრცის $dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ ელემენტში, უდრის

$$\frac{2 dx dy dz dp_x dp_y dp_z}{h^3} \cdot f(E) = \frac{2m^3}{h^3} f(E) dv_x dv_y dv_z$$

$$(dx dy dz = 1 \text{ სმ}^3).$$

ელექტრონების რიცხვი, რომელთა სიჩქარის x კომპონენტი მოთავსებულია v_x და $v_x + dv_x$ შორის, როგორც არ უნდა ჰქონდეს სიჩქარის v_y და v_z კომპონენტები, უდრის

$$n(v_x) dv_x = \frac{2m^3}{h^3} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} f(E) dv_z =$$

$$= \frac{2m^3}{h^3} e^{\left(\frac{mv_x^2}{2} + \mu\right) / kT} \cdot dv_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mv_y^2}{2kT}} dv_y \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}} dv_z.$$

მაგრამ

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mv_y^2}{2kT}} dv_y = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}} dv_z = \sqrt{\frac{2\pi kT}{m}},$$

ამიტომ

$$n(v_x) dv_x = \frac{4\pi m^2}{h^3} (kT) \cdot e^{-\left(\frac{mv_x^2}{2} + \mu\right) / kT} dv_x. \quad (11.3)$$

კრისტალის ზედაპირის 1 სმ² ზედაპირიდან O_x ღერძის მიმართულებით ერთ წამში ვაკუუმში გამოსული ელექტრონების რიცხვი უდრის

$$I_1 = \int_{v_x^0}^{\infty} v_x n(v_x) dv_x = \frac{4\pi m^2}{h^3} (kT)^2 e^{\frac{\mu}{kT}} \times \\ \times \int_{v_x^0}^{\infty} v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}} dv_x = \frac{4\pi m}{h^3} (kT)^2 e^{-\frac{\chi_0 + \mu}{kT}} \\ \left(\frac{mv_x^2}{2} = \chi_0 \right). \quad (11.4)$$

χ_0 ათვლილია გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირიდან ზევით, ხოლო μ — გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირიდან ქვემოთ. ამიტომ $\chi_0 - \mu = \chi_1$ წარმოადგენს მუშაობის იმ რაოდენობას, რომელიც საჭიროა ელექტრონი გადავიყვანოთ ქიმიური პოტენციალის (ფერმის დონე) დონიდან ვაკუუმში, უფრო მოხერხებულია χ_1 სიდიდით დავახასიათოთ მოცემული კრისტალიდან გამოსვლის მუშაობა.

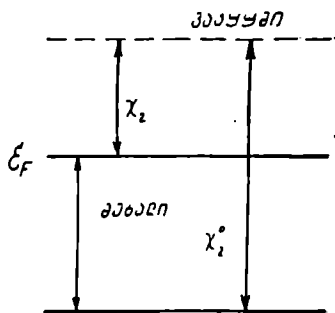
ამრიგად

$$I_1 = \frac{4\pi m}{h^3} (kT)^2 \cdot e^{-\frac{\chi_1}{kT}}. \quad (11.5)$$

როდესაც ნახევარგამტარიდან ელექტრონები გადადიან ვაკუუმში, ნახევარგამტარის ზედაპირზე წარმოიშობა დადებითი მუხტები, რომლის ელექტრული ველი ხელს უშლის ელექტრონების შემდგომ ემისიას — გა-

დასვლას ვაკუუმში, ბოლოს დამყარდება წონასწორობა, ელექტრონების ემისია ვაკუუმში შეწყდება.

სრულიად ანალოგიური მდგომარეობაა მეტალის შემთხვევაში. მეტალებში ელექტრონების განაწილება ენერგიის მიხედვით მოცემულია ფერმიდირაკის კანონით. თანახმად ამ კანონისა, $T=0$ ტემპერატურაზე ყველა კვანტური მდგომარეობა ფერმის ღონის ქვემოთ დაკავებულია ელექტრონებით, ხოლო $T>0$ ტემპერატურაზე ელექტრონები ღებულობენ დამატებით ენერგიას—სივრცით ენერგიას და იკავებენ ფერმის ღონის ზედა მახლობელ ღონეებს. სწორედ ეს ელექტრონები ღებულობენ მონაწილეობას ელექტრონულ ემისიაში. მაგრამ მათი რიცხვი ძალზე მცირეა ელექტრონების საერთო რიცხვთან შედარებით, ამიტომ მათთვის შეიძლება დიდი სიზუსტით გამოვიყენოთ ბოლცმანის განაწილება. ამიტომ მეტალის ზედაპირის 1 სმ²-დან ერთ სეკუნდში ემიტირებული ელექტრონების რიცხვი მოიცემა ანალოგიური ფორმულით



ნახ. 98.

$$I_2 = \frac{4\pi m}{h^3} (kT)^2 e^{-\chi_2/kT} \quad (11.6)$$

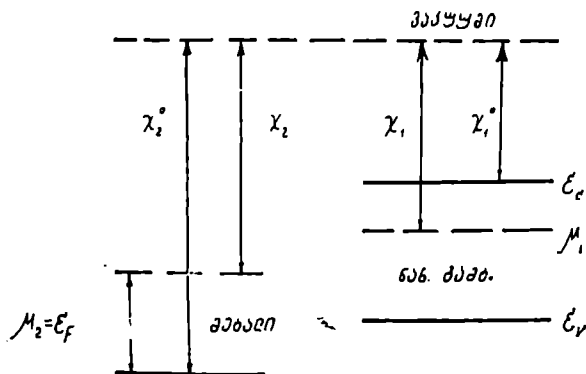
$$(\chi_2 = \chi_1^* - \mu_1),$$

სადაც χ_2 არის მეტალიდან გამოსვლის მუშაობა—მანძილი ფერმის ღონიდან ვაკუუმის ღონემდე (ნახ. 98).

ჭერ ვიგულისხმობთ, რომ მეტალი და n ტიპის ნახევარგამტარი ერთიმეორისაგან დაშორებულია d სისქის დიელექტრიკული ფენით (ნახ. 99).

ნახევარგამტარიდან ემიტირებული ელექტრონები (I_1) ეცემიან დიელექტრიკული ფენის გავლით მეტალის ზედაპირს და ასევე მეტალიდან ემიტირებული ელექტრონები (I_2) ეცემიან ნახევარგამტარის ზედაპირს, მაგრამ თუ $\chi_2 > \chi_1$, მაშინ, თანახმად (11.5) და (11.6) ფორმულებისა, $I_1 > I_2$. ამიტომ საბოლოო ჯამში, მეტალი დაიმუხტება უარყოფითად, ხოლო ნახევარგამტარი—დადებითად. ეს კი წარმოშობს ელექტრულ ველს, რომელიც მიმართულია ნახევარგამტარიდან მეტალისაკენ. ასეთი მიმართულების ველი ხელს არ უშლის ელექტრონების მოძრაობას მეტალიდან ნახევარგამტარისაკენ. პირიქით, ყოველი ელექტრონი, რომელიც გამოვიდა მეტალის ზედაპირიდან ამ ველის მოქმედებით, აუცილებლად მიაღწევს ნახევარგამტარის ზედაპირს. ხოლო რაც შეეხება ნახევარგამტარიდან გა-

მოსულ ელექტრონებს, მათთვის ეს ევლი წარმოადგენს გარკვეულ პოტენციალურ ბარიერს. თუ წარმოშობილ პოტენციალთა სხვაობას აღვნიშნავთ V -თი, მაშინ ნახევარგამტარიდან გამოსული ელექტრონებიდან მეტალის



ნახ. 99.

ზედაპირს მიღწევს მხოლოდ ის ნაწილი, რომელთა ენერგია მეტია, ვიდრე $\varphi = -eV$ (ბარიერის სიმაღლე).

ნახევარგამტარიდან ვაკუუმში გამოსვლა შეუძლიათ იმ ელექტრონებს, რომელთა ენერგია მეტია χ_1 -ზე და, გარდა ამისა, ბარიერის გადალახვისათვის სჭირდება φ ენერგია. ამიტომ ნახევარგამტარის ის ელექტრონები მიღწევენ მეტალის ზედაპირამდე, რომელთა კინეტიკური ენერგია მეტია $\chi_1 + \varphi$ -ზე, ასეთი ელექტრონების რიცხვი მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$I_1 = \frac{4\pi m}{h^3} (kT)^{3/2} e^{-\frac{\chi_1 + \varphi}{kT}}. \quad (11.7)$$

ელექტრონების ნაკადი მეტალიდან ნახევარგამტარისაკენ (11.6) უცვლელი დარჩება, რადგან, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, მათთვის ბარიერი არ არსებობს. ეს ორი ერთმანეთის საწინააღმდეგო მიმართულებების ელექტრონების ნაკადი გარკვეული დროის შემდეგ მოვა წონასწორობის მდგომარეობაში. ამ დროს $I_1 = I_2$. თუ წონასწორობის დროს დამყარებულ პოტენციალთა სხვაობას აღვნიშნავთ V_0 -ით, ანდა ბარიერის სიმაღლეს $\varphi_0 = -eV_0$ -ით, მაშინ $I_1 = I_2$ პირობა გვაძლევს:

$$e^{-\frac{\chi_1 + \varphi_0}{kT}} = e^{-\frac{\chi_2}{kT}}, \quad (11.10)$$

აქედან

$$\varphi_0 = \chi_2 - \chi_1,$$

მაშასადამე, n ტიპის ნახევარგამტარსა და მეტალს შორის შექმნილი ბარიერის სიმაღლე უდრის მათი გამოსვლის მუშაობათა სხვაობას. ხშირად მას შოტკის ბარიერს უწოდებენ.

ჩვენ განვიხილეთ შემთხვევა, როდესაც ნახევარგამტარსა და მეტალს შორის წონასწორობა მყარდება დიელექტრიკული ფენის საშუალებით. მდგომარეობა არ შეიცვლება, თუ დიელექტრიკული ფენა არა გვაქვს და მეტალი უშუალოდ შეხებაში იმყოფება ნახევარგამტართან. ამიტომ მათ შორის წარმოშობილ პოტენციალთა სხვაობას უწოდებენ კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობას.

კონტაქტური ველის დაძაბულობა

$$E = \frac{V_0}{d} = \frac{\chi_2 - \chi_1}{ed}.$$

მუხტების ზედაპირული სიმკვრივე

$$\sigma = \frac{E}{4\pi} = \frac{\chi_2 - \chi_1}{4\pi ed}.$$

ელექტრონების ზედაპირული სიმკვრივე

$$N = \frac{\sigma}{e} = \frac{\chi_2 - \chi_1}{4\pi de^2}. \quad (11.11)$$

ორი სხეულის შეხების დროს კარგი კონტაქტი არ მიიღება (მხოლოდ რამდენიმე წერტილში გვექნება კონტაქტი). კარგი კონტაქტის მიღება შესაძლებელია ნახევარგამტარის ზედაპირზე მეტალის თხელი ფენის დაფარვით ანდა პირიქით—მეტალის ზედაპირზე ნახევარგამტარის თხელი ფენის დაფარვით. ასეთი გზით მიღებული კონტაქტური ფენის სისქე $d \sim 10^{-7}$ სმ, გამოსვლის მუშაობათა სხვაობა $\chi_2 - \chi_1 \sim 1$ ვოლტი. თუ ამ მნიშვნელობებს შევიტანთ (11.11) ფორმულაში, მივიღებთ:

$$N \simeq 5 \cdot 10^{12} \text{ ელექტრონი.}$$

საერთო ჯამში, ასეთი რიცხვი ელექტრონებისა გადადიან ნახევარგამტარიდან მეტალში, რის შედეგად მეტალი იმუხტება უარყოფითად, ხოლო n ნახევარგამტარი—დადებითად. მეტალში თავისუფალი ელექტრონების სიმკვრივე $\sim 10^{20}$ რიგისაა, ამიტომ n ნახევარგამტარიდან მეტალში გადასული ელექტრონები, უხეშად რომ ვთქვათ, განლაგდებიან ერთ ატომურ ფენაში. სულ სხვა მდგომარეობა გვაქვს ნახევარგამტარში. n ტიპის ნახევარგამტარში ელექტრონები მიიღებიან დონორების იონიზაციის შედეგად, რომელთა კონცენტრაცია რამდენიმე რიგით ნაკლებია მეტალში თავისუფალი ელექტრონის კონცენტრაციასთან შედარებით. ვთქვათ $N_d \simeq 10^{14}$ სმ $^{-3}$, ამასთან ვიგულისხმობთ, რომ ყველა დონორი იონიზირებულია. მაშინ $5 \cdot 10^{12}$ ელექტრონის გადასვლა ნახევარგამტარიდან მეტალში

მოგვეცემს დაახლოებით $\frac{5 \cdot 10^{12}}{10^{14}} = 5 \cdot 10^{-2}$ სმ სისქის ნახევარგამტარის

ფენის გაღარიბებას ელექტრონებით კონტაქტის მახლობლად, რაც შეადგენს რამდენიმე ასეულ ატომურ ფენას. აღნიშნულ ფენაში იონიზირებული დონორების დადებითი მუხტები მთლიანად კომპენსირებული არ იქნება ელექტრონებით, ამიტომ ამ გარდამავალ ფენაში გვექნება იონიზირებული დონორების დადებითი მუხტების (უმოძრაო მუხტების) მოცულობითი სიმკვრივე. მეორე მხრივ, ცნობილია, რომ, თუ კრისტალის მოცულობის რომელიმე ელემენტში მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე ნულს არ უდრის, მაშინ მოცულობის ამ ელემენტში გვექნება ელექტრული ველი. მეტალ-ნახევარგამტარის შეხების დროს კონტაქტის მახლობლად n ნახევარგამტარში წარმოიშობა რაღაც L სისქის მოცულობითი მუხტების არე. ამ ფენაში მიიღება ელექტრული ველი (კონტაქტური ველი). იგი წარმოადგენს გარკვეული სიმაღლის ბარიერს ელექტრონებისათვის, რომლებიც ნახევარგამტარიდან მეტალში გადადიან, ხოლო ელექტრონებისათვის, რომლებიც მეტალიდან ნახევარგამტარში გადადიან ეს ბარიერი არ არსებობს. უნდა აღინიშნოს ის გარემოება, რომ მეტალ-ნახევარგამტარის $d \sim 10^{-7}$ სმ სისქის უშუალო კონტაქტი სრულიად გამჭვირვალეა ელექტრონებისათვის. ამრიგად, კონტაქტური ველი (ანდა მოცულობითი მუხლის არე) პრაქტიკულად იჭრება ნახევარგამტარში. ამასთან, ველის შეჭრის სიღრმე მით მეტია, რაც ნაკლებია დონორების სიმკვრივე. გამოთვლები გვიჩვენებენ, რომ კონტაქტიდან მოშორებით პოტენციალი ეცემა ექსპონენციალური კანონით,

$$V(x) = V_0 e^{-x/L_D}, \quad (11.12)$$

სადაც $V_0 = \varphi_0/e$ არის კონტაქტური პოტენციალი, L_D — დეზაის ეკრანირების სიგრძე. ეს ის მანძილია, რომელზედაც პოტენციალი ეცემა e -ჯერ. დეზაის ეკრანირების სიგრძე სხვადასხვა მასალებისათვის განისაზღვრება შემდეგი ფორმულიდან

$$L_D = \sqrt{\frac{\kappa k T}{4\pi n_0 e^2}}. \quad (11.13)$$

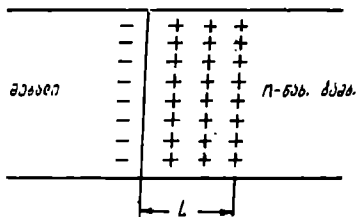
ცხადია, რომ დეზაის ეკრანირების სიგრძე ბევრად ნაკლებია ნახევარგამტარში ველის შეჭრის სიგრძესთან შედარებით $L_D < L$. ნახ. 100-ზე მოცემულია უხეში მოდელი, როდესაც კონტაქტიდან L მანძილზე დონორები მთლიანად იონიზირებულია და სათანადო ელექტრონები გადასულია p არეში. ამიტომ მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე

$$\begin{aligned} \rho &= eN_d = en_0 & \text{როცა } 0 < x < L \\ \rho &= 0 & \text{" } x > L \end{aligned} \quad (11.14)$$

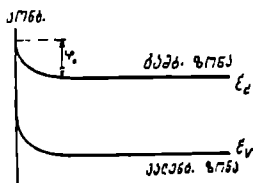
ფაქტიურად, უშუალო კონტაქტთან $x=0$ მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე მაქსიმალურია, კონტაქტიდან მოშორებით მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე სთანდათანობით ეცემა და $x=L$ წერტილზე უტოლდება ნულს. $x>L$ წერტილებში იონიზირებული დონორების დადებითი მუხტები უდრის თავისუფალი ელექტრონების უარყოფით მუხტებს, ამიტომ მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე ნულის ტოლია.

შემდეგში მოცულობითი მუხტების არეს ($0 < x < L$) ვუწოდოთ გარდამავალი ფენა.

კონტაქტური ველი ბევრად ნაკლებია შიდა კრისტალურ ველზე, რომელიც პასუხისმგებელია ზონური სურათისა, ამიტომ კონტაქტურ ველს არ შეუძლია აკრძალული ზონის სიგანის შეცვლა. ზონურ მიახლოებაში ელექტრონი მოძრაობს მესერიის პერიოდულ ველში, ამიტომ გამტარებლობის ქვედა ნაპირზე მდებარე ელექტრონის ენერგიის უმნიშვნელობა არ არის დამოკიდებული ელექტრო-



ნახ. 100.



ნახ. 101.

$E_c + \varphi(x)$, ამიტომ კონტაქტის მახლობლად ზონა იქნება აწეული ზევით ან ქვევით, იმისდამოკიდებით, თუ რა ნიშანი იქნება $\varphi(x)$ (ნახ. 101).

$$\varphi(0) = \varphi_0 = \chi_2 - \chi_1$$

$$\varphi(L) = 0.$$

გამტარის მოცულობაში გამტარებლობის ელექტრონების სიმკვრივე უდრის

$$n = n_0 = N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}},$$

ანდა

$$n_0 = N_c e^{\frac{\mu}{kT}}.$$

თუ ენერგიას ავითვლით გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირიდან $E_c=0$, მაშინ გარდამავალ ფენაში გამტარებლობის ელექტრონების სიმკვრივე იქნება

$$n(x) = N_c e^{-\frac{E_c + \varphi(x) - \mu}{kT}} = n_0 e^{-\frac{\varphi(x)}{kT}}. \quad (11.15)$$

როდესაც $\varphi(x)$ დადებითია, გარდამავალ ფენაში გვექნება ელექტრონების გაღარიბება $n(x) < n_0$ და პირიქით, როდესაც $\varphi(x) < 0$, გარდამავალ ფენაში გვექნება ელექტრონებით გაძლიერება $n(x) > n_0$. მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე

$$\begin{aligned} \rho(x) &= e(N_d^+ - n(x)), \text{ როცა } x < L \\ \rho &= 0, \text{ „ } x \geq L \end{aligned} \quad (11.16)$$

სადაც N_d^+ იონიზირებული დონორების სიმკვრივეა. დავუშვათ, რომ ყველა დონორი იონიზირებულია $N_d^+ = N_d$. გარდა ამისა მივიღოთ, რომ გარდამავალი ფენიდან ყველა ელექტრონი გადასულია მეტალში, მაშინ

$$\rho = eN_d = en_0.$$

თუ მივიღებთ ასეთ უხეშ დაშვებას, მაშინ პოტენციალი შეიძლება განვსაზღვროთ პუასონის განტოლებიდან

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{4\pi\rho}{\kappa}, \quad (11.17)$$

სადაც κ — კრისტალის დიელექტრიკული მუდმივაა.

ჩაღვანაც $\varphi = -eV$, ნაცვლად (11.17) განტოლებისა გვექნება

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e^2 n_0}{\kappa}. \quad (11.18)$$

მოვნახოთ ამ განტოლების ამოხსნა შემდეგი საწყისი პირობების გათვალისწინებით

$$\varphi(L) = 0 \text{ და } E = -\frac{1}{e} \frac{d\varphi}{dx} \Big|_{x=L} = 0. \quad (11.19)$$

ადვილად შეიძლება შევამოწმოთ, რომ (11.18) განტოლების ამოხსნას, (11.19) პირობის გათვალისწინებით, წარმოადგენს

$$\varphi(x) = \frac{2\pi e^2 n_0}{\kappa} (L-x)^2. \quad (11.20)$$

აქედან კონტაქტური ველის დაძაბულობისათვის ვღებულობთ:

$$E = -\frac{1}{e} \frac{d\varphi}{dx} = \frac{4\pi e n_0}{\kappa} (L-x). \quad (11.21)$$

მაშასადამე, კონტაქტური ველი მაქსიმალურია $x=0$ წერტილზე და შემდეგ ეცემა წრფივი კანონით ნულამდე $x=L$ წერტილზე.

$x=0$ წერტილზე $\varphi(0)=\varphi_0=\chi_2-\chi_1$, ამიტომ თანახმად (11.21) ფორმულისა, ვღებულობთ

$$L=\left(\frac{x\varphi(0)}{4\pi e^2 n_0}\right)^{1/2}=\left(\frac{x(\chi_2-\chi_1)}{4\pi e^2 n_0}\right)^{1/2}. \quad (11.22)$$

მაშასადამე, ველის შეჭრის სიღრმე (გარდამავალი ფენის სისქე) ნახევარგამტარში მით მეტია, რაც უფრო ნაკლებია დონორების კონცენტრაცია ($n_0=N_d$), რაც სავსებით გასაგებია.

მაშასადამე, როდესაც მეტალი იმყოფება n ტიპის ნახევარგამტართან კონტაქტში, მაშინ, თუ $\chi_2 > \chi_1$ გარდამავალ ფენაში მიიღება დენის მატარებელთა (ელექტრონების) გადარიბება (გარდამავალ ფენაში პლუსებით აღნიშნულია უმოძრაო იონიზირებული დონორები), ამიტომ ასეთი ფენა დენს დიდ წინააღმდეგობას უწევს. მას ჩამკეტ ფენას უწოდებენ. როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, $d \sim 10^{-7}$ სმ სისქის კონტაქტი ელექტრონისათვის არაეფექტურ ბარიერს არ წარმოადგენს. ტალღური ბუნების გამო ასეთ ბარიერში ელექტრონი თავისუფლად გადის. სრულიად ანალოგიური შედეგი მიიღება იმ შემთხვევაში, როდესაც მეტალი შეხებაში იმყოფება p ტიპის ნახევარგამტართან, სადაც დენის ძირითადი მატარებლები ხვრელებია. თუ $\chi_2 > \chi_1$, მაშინ, ისე როგორც წინა შემთხვევაში, ელექტრონების ნაკადი p ნახევარგამტარიდან მეტალში მეტი იქნება, ვიდრე შებრუნებული ნაკადი, ამიტომ მეტალი დაიმუხტება უარყოფითად, ხოლო p ტიპის ნახევარგამტარი — დადებითად. მაგრამ p ტიპის ნახევარგამტარში ელექტრონები წარმოადგენენ არაძირითად მატარებლებს, ამიტომ ნახევარგამტარის მხარეზე გარდამავალ ფენაში ელექტრონებით გადარიბება ნიშნავს ხვრელებით (ძირითადი მატარებლებით) გამდიდრებას, გარდამავალ ფენას ექნება გადიდებული გამტარებლობა. მას ანტიჩამკეტ ფენას უწოდებენ. გარდამავალ ფენაში ხვრელების კონცენტრაცია იქნება

$$p(x)=p_0 e^{\frac{\varphi(x)}{kT}}, \quad (11.23)$$

სადაც p_0 არის ხვრელების კონცენტრაცია მოცულობის შიგნით p ნახევარგამტარში. თუ $\chi_2 < \chi_1$, მაშინ გარდამავალ ფენაში გვექნება გამდიდრება ელექტრონებით, ე. ი. გადარიბება ხვრელებით, ამიტომ ასეთი ფენა იქნება ჩამკეტი. ჩამკეტი ფენის სისქე მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$L_p=\left(\frac{x(\chi_1-\chi_2)}{4\pi e^2 p_0}\right)^{1/2}. \quad (11.24)$$

§ 2. დენის გასწორება მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე

როგორც წინა პარაგრაფში იყო აღნიშნული, გარდამავალ ფენაში გვაქვს მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე, რომელიც ქმნის ელექტრულ

ველს. $\chi_2 > \chi_1$ შემთხვევაში ეს ველი მიმართულია ნახევარგამტარიდან მეტალისაკენ და მაშასადამე, გვაძლევს ელექტრონების მოძრაობას კონტაქტიდან ნახევარგამტარისაკენ, სათანადო ომური დენი

$$j = neu_n E,$$

სადაც E არის კონტაქტური ველი, n — ელექტრონების სიმკვრივე. და u_n — ელექტრონების ძვრადობის კოეფიციენტი. მეორე მხრივ, ელექტრონების სიმკვრივე უშუალოდ კონტაქტთან მინიმალურია და თანდათანობით იზრდება ნახევარგამტარის მოცულობისაკენ, $x = L$ წერტილზე უტოლდება მოცულობით სიმკვრივეს n_0 -ს. ელექტრონების კონცენტრაციის გრადიენტი მოგვცემს ელექტრონების მოძრაობას ნახევარგამტარის მოცულობიდან კონტაქტისაკენ. ელექტრონების ასეთ მოძრაობას ეთანადება დიფუზიური დენი, რომელიც ტოლია

$$j_D = e D_n \frac{dn}{dx}. \quad (11.25)$$

გარდამავალ ფენაში სრული დენი ტოლია

$$j = neEu_n + eD_n \frac{dn}{dx}.$$

გარდამავალ ფენაში ელექტრონების სიმკვრივე მოცემულია (11.15) ფორმულით, ამიტომ

$$\frac{dn}{dx} = -\frac{1}{kT} n(x) \frac{d\varphi}{dx} = -\frac{e}{kT} nE,$$

სრული დენი

$$j = enE \left(u_n - e \frac{D_n}{kT} \right).$$

მეორე მხრივ, ნებისმიერი ნაწილაკის ძვრადობისა და დიფუზიის კოეფიციენტები დაკავშირებულია ერთმანეთთან აინშტაინის ფორმულით

$$u_n = \frac{e}{kT} D_n.$$

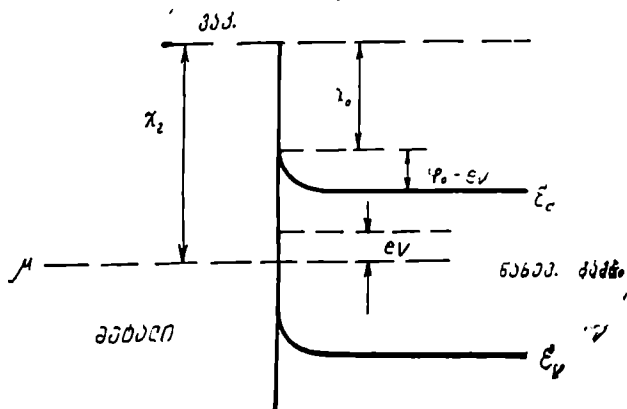
ამიტომ $j = 0$.

ამრიგად, კონტაქტურ ფენაში ომური და დიფუზიური დენები ერთმანეთს აკომპენსირებენ. ვინაიდან გახსნილ წრედში დენი არა გვაქვს, ჩვენ შეგვეძლო $j = 0$ პირობიდან დაგვედგინა აინშტაინის თანათარალობის სისწორე.

სულ სხვა მდგომარეობას აქვს ადგილი, როდესაც მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე მოდებულია გარეგანი ძაბვა V . როგორც ვიცით, წონასწორობაში მყოფი სხეულების ქიმიური პოტენციალები ერთმანეთის ტოლია, მაგრამ გარეგანი ველის მოდების დროს წონასწორობა ირღვევა და ქიმიურ პოტენციალებს შორის სხვაობა იქნება eV -ს ტოლი. თუ მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე მოდებულია გარეგანი V ძაბვა ჩამკეტი

მიმართულებით, მაშინ ბარიერის სიმაღლე გახდება $\varphi_0 + eV$, სადაც $\varphi_0 = eV_0$. V_0 კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობაა. თუ გარეგანი ძაბვა მოდებულია ანტიჩამკეტი ანდა გამშვები მიმართულებით, მაშინ ბარიერის სიმაღლე იქნება $\varphi_0 - eV$ (ნახ. 102). შესაბამისად ამისა, გარდამავალი ფენის (მოცულობითი მუხტების არე) სისქე იქნება

$$L = \left(\frac{\kappa(\varphi_0 \pm eV)}{2\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}. \quad (11.26)$$



ნახ. 102.

მაშასადამე, როდესაც მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე მოდებულია გარეგანი ძაბვა კონტაქტური ველის მიმართულებით, გარდამავალი ფენის სისქე გაიზრდება. გაიზრდება კონტაქტური ფენის ელექტრული წინააღმდეგობაც, რის შედეგად კონტაქტში გაივლის სუსტი დენი. როდესაც გარეგანი ველის მიმართულება საწინააღმდეგოა კონტაქტური ველისა, მაშინ გარდამავალი ფენის სისქე შემცირდება, კერძოდ, როდესაც $\varphi_0 = eV$ -ს, გარდამავალი ფენა მთლიანად გაქრება. ამიტომ გარდამავალი ფენის ელექტრული წინააღმდეგობის შემცირების გამო კონტაქტში გაივლის ძლიერი დენი. ამრიგად, მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტს გააჩნია ცალმხრივი გამტარობა, ამიტომ იგი შეიძლება გამოყენებული იქნეს ცვალებადი დენის გასწორებისათვის.

ჩვენ ზემოთ ვუჩვენეთ, რომ ელექტრონების ნაკადი გამოსული მეტალის ზედაპირიდან განისაზღვრება χ_2 გამოსვლის მუშაობით, ამიტომ შეიძლება გვეფიქრა, რომ სწორედ ასეთი კინეტიკური ენერგიის ელექტრონები გადადიან მეტალიდან ნახევარგამტარში. მაგრამ ეს ასე არ არის, რადგანაც ჩვეულებრივ ტემპერატურაზე χ_2 კინეტიკური ენერგიის მქონე ელექტრონები მეტალში თითქმის არა გვაქვს. მეორე მხრივ, რო-

გორც ამას კვანტური მექანიკა გვიჩვენებს, ტალღური ბუნების გამო ელექტრონს შეუძლია ენერგიის ცვლილების გარეშე გარკვეული ალბათობით (გვირავებული გზით) გავიდეს ნებისმიერი სიმაღლისა და სიგანის ბარიერში. ამასთან, თხელი ბარიერი ელექტრონებისათვის არ წარმოადგენს რაიმე დაბრკოლებას. მაგრამ ელექტრონი რომ გადავიდეს მეტალიდან ნახევარგამტარში, საკმარისი არ არის მარტო გავლა ბარიერში. ამისათვის აუცილებელია შესაბამისი ენერგიის ღონე ნახევარგამტარში დაკავებული არ იყოს სხვა ელექტრონით. წინააღმდეგ შემთხვევაში ისინი უკანვე აირეკებიან ნახევარგამტარის ზედაპირიდან. თანახმად ნახ. 103-სა, მეტალიდან ელექტრონი რომ გადავიდეს ნახევარგამტარში, საჭიროა $\chi_2 - \chi_0 = \varphi_0 - \mu \ll \chi_2$ სიმაღლის ბარიერის გადალახვა, რომელიც, როგორც ვხედავთ, გარეგან ძაბვაზე დამოკიდებული არ არის. ასეთი ელექტრონების რიცხვი მოიცემა შემდეგი ფორმულით.

$$I_2 = \frac{4\pi m}{h^2} (kT)^2 e^{-\frac{\varphi_0 - \mu}{kT}}. \quad (11.27)$$

წონასწორობის დროს ($V=0$) ელექტრონების ნაკადი მეტალიდან ნახევარგამტარში (I_2) უდრის ელექტრონების ნაკადს ნახევარგამტარიდან მეტალში (I_1), ადვილად შეიძლება ვაჩვენოთ, რომ

$$I_1^0 = I_2 = \frac{1}{4} n_1 \bar{v}, \quad (11.28)$$

სადაც

$$\bar{v} = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2} \text{ და } n_1 = n_0 e^{\frac{\varphi_0}{kT}}.$$

n_1 არის ელექტრონების კონცენტრაცია $x=0$ წერტილზე, როდესაც $V=0$. როდესაც $V \neq 0$, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, I_2 არ შეიცვლება, შეიცვლება მხოლოდ ნაკადი ნახევარგამტარიდან მეტალში, ეს უკანასკნელი შეიძლება ჩაიწეროს შემდეგი სახით

$$I_1 = \frac{1}{4} n(0) \bar{v}, \quad (11.29)$$

სადაც $n(0)$ არის ელექტრონების კონცენტრაცია $x=0$ წერტილზე, როდესაც $V \neq 0$.

ამრიგად, რეზულტატური ნაკადი ელექტრონებისა ნახევარგამტარიდან მეტალში იქნება

$$I = I_1 - I_2 = \frac{1}{4} \bar{v} (n(0) - n_1).$$

სათანადო დენის სიმკვრივე

$$j = eI = \frac{1}{4} e \bar{v} (n(0) - n_1). \quad (11.30)$$

რომ გავიგოთ $n(0)$, ამისათვის საჭიროა დავადგინოთ $n(x)$ ფუნქციის სახე. განვიხილოთ ორი კერძო შემთხვევა: ა) როდესაც გარდამავალი ფენის სისქე ბევრად აღემატება ელექტრონის თავისუფალ განარბენს და ბ) როდესაც გარდამავალი ფენის სისქე ელექტრონის თავისუფალი განარბენის რიგისაა. ეს პირობები მათემატიკურად ჩაიწერება შემდეგი სახით*.

$$L \ll \frac{2\varphi_0}{kT}, \quad l - \text{თხელი კონტაქტური ფენა}$$

$$L \gg \frac{2\varphi_0}{kT}, \quad l - \text{სქელი "}$$
(11.31)

ა) თხელი კონტაქტური ფენის შემთხვევა (დიოდური თეორია)

თხელი კონტაქტური ფენის შემთხვევაში გარდამავალ ფენაში ელექტრონების გაბნევა შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ყველა ის ელექტრონები, რომელთა კინეტიკური ენერგია მეტია ბარიერის სიმაღლეზე $\varphi_0 - eV$, ნახევარგამტარიდან გადავლენ მეტალში. ასეთი ელექტრონების რიცხვი შეიძლება მივიღოთ (11.15) ფორმულიდან, თუ φ_0 შევცვლით $\varphi_0 - eV$ -თი,

$$n(0) = n_1 e^{eV/kT},$$

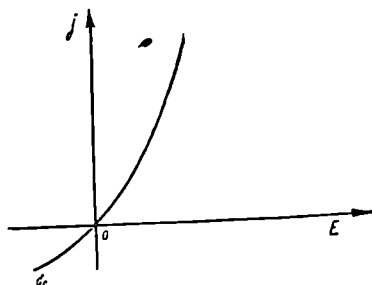
მაშასადამე, კონტაქტში გამავალი დენის სიმკვრივისათვის ვღებულობთ შემდეგ ფორმულას:

$$j = \frac{1}{4} n_1 e \overline{v} \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right).$$
(11.32)

როგორც ვხედავთ, გამშვები მიმართულებით ($eV > 0$) დენის სიმკვრივე იზრდება ძაბვის გადიდებით ექსპონენციალური კანონით

$$j \sim e^{eV/kT},$$

ხოლო ჩამკეტი მიმართულებით ($eV < 0$) დენის სიმკვრივე აღწევს ნაწილობას



ნახ. 103.

* ეს უტოლობები მოიღება შემდეგი პირობიდან: კონტაქტურ არეში თავისუფალი განარბენის მანძილზე შესრულებული მუშაობა იყოს ბევრად მეტი ან ნაკლები სითბურ ენერგიასთან შედარებით, ე. ი. $eE_0 \gg kT$ ანდა $eE_0 \ll kT$, სადაც l არის ელექტრონის თავისუფალი განარბენის სიდიდე. თუ გარდამავალ ფენაში ეელის დაძაბულობისათვის ავიღებთ V/L მნიშვნელობას ($\varphi_0 = eV$), მივიღებთ (11.31) უტოლობებს.

$$j_s \rightarrow \frac{1}{4} n_1 e \bar{v} \quad (11.33)$$

(11.32) ფორმულით მოცემული დამოკიდებულება დენის სიმკვრივესა და გარეგან ძაბვას შორის (ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი) ნაჩვენებია ნახ. 103-ზე.

ზუსტად ასეთი სახის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი მიიღება ვაკუუმური დიოდებისათვის, ამიტომ გამართვის ზემოთ განხილულ თეორიას უწოდებენ დიოდურ თეორიას.

ბ) სქელი კონტაქტური ფენის შემთხვევა (დიფუზური თეორია)

სქელი გარდამავალი ფენის შემთხვევაში ელექტრონების ნაწილი, რომელთა ენერგია ბარიერის სიმაღლეზე მეტია, დიფუზური გაბნევის გამო შეიძლება არ გადავიდეს ნახევარგამტარიდან მეტალში. ელექტრონების დიფუზური გაბნევა გამოიწვევს გარდამავალ ფენაში მუხტების განაწილებას ანდა კონტაქტური ველის შეცვლას. მაგრამ როგორც ამას ეუჩვენებთ ქვემოთ, ეს გარეგნობა არსებით გავლენას ახდენს დენზე ჩამკეტი მიმართულებით. გამტარებლობის ელექტრონების კონცენტრაციას გარდამავალ ფენაში განვსაზღვრავთ სრული დენის გამოსახულებიდან

$$j = e \left(E n u_n + D_n \frac{dn}{dx} \right). \quad (11.34)$$

აქედან

$$\frac{dn}{dx} + \frac{u_n}{D_n} E n = \frac{j}{e D_n} = \text{const.} \quad (11.35)$$

დენის გამართვის თეორიას, რომელიც აგებულია ამ განტოლების ამოხსნაზე, ეწოდება დიფუზური თეორია,

ამრიგად ჩვენ ვეძებთ (11.35) განტოლების ამოხსნას შემდეგი საწყისი პირობების გათვალისწინებით:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \varphi_0 - eV & n(0) &\simeq n_1 = n_0 e^{-\varphi_0/kT} \\ \varphi(L) &= 0 & n(L) &= n_0 \end{aligned} \quad (11.35)$$

(11.35) განტოლების ამოხსნა ვეძებთ შემდეგი სახით:

$$n(x) = c(x) e^{-\frac{\varphi(x)}{kT}}.$$

(11.37)-ის ჩასმა (11.35)-ში გვაძლევს:

$$j = \frac{e D_n (c(L) - c(0))}{\int_0^L e^{\varphi/kT} dx}.$$

მეორე მხრივ, თანახმად სასაზღვრო პირობისა (11.36), გვაქვს

$$n(L) = c(L) e^{-\frac{\varphi(L)}{kT}} = c(L) = n_0$$

და

$$n(0) = c(0) e^{-\frac{\varphi(0)}{kT}} \simeq n_1.$$

აქედან

$$c(0) = n_1 e^{\frac{\varphi(0)}{kT}} = n_1 e^{\frac{\varphi_0 - eV}{kT}} = n_0 e^{-\frac{eV}{kT}}.$$

$c(0)$ და $c(L)$ მნიშვნელობათა ჩასმა j -ს გამოსახულებაში გვაძლევს:

$$j = e D_n n_0 \frac{1 - e^{-eV/kT}}{\int_0^L e^{\frac{\varphi(x)}{kT}} dx}.$$

მაგრამ

$$\int_0^L e^{\frac{\varphi(x)}{kT}} dx = \int_{\varphi_0 - eV}^0 e^{\frac{\varphi(x)}{kT}} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)^{-1} d\varphi.$$

რადგანაც $x=0$ წერტილზე $\varphi(0)$ -ს აქვს მაქსიმალური მნიშვნელობა, ხოლო $x>0$, $\varphi(x)$ მკვეთრად ეცემა, ამიტომ მიახლოებით შეგვიძლია დავწეროთ

$$\begin{aligned} \int_0^L e^{\frac{\varphi(x)}{kT}} dx &\simeq \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_0^{-1} \int_{\varphi_0 - eV}^0 e^{\frac{\varphi(x)}{kT}} d\varphi = \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_0^{-1} kT \left(1 - e^{\frac{\varphi_0 - eV}{kT}} \right) \sim \\ &\sim - \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_0^{-1} kT e^{\frac{\varphi_0 - eV}{kT}}. \end{aligned}$$

ამრიგად

$$\begin{aligned} j &= - \frac{e D_n}{kT} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_0 n_0 e^{-\frac{\varphi_0}{kT}} \left(1 - e^{\frac{eV}{kT}} \right) = \\ &= e n_0 n_1 E_0 \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right) = j_s \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right), \end{aligned} \quad (11.38)$$

სადაც

$$E_0 = \frac{1}{e} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_0. \quad (11.39)$$

არის ველის დაძაბულობა $x=0$ წერტილში, თუ ვისარგებლებთ (11.26) ფორმულით, მივიღებთ:

$$E_0 = \frac{4\pi en_0 L}{x} = \left(\frac{8\pi n_0}{x} (\varphi_0 - eV) \right)^{1/2}. \quad (11.40)$$

მაშასადამე, სქელი გარდამავალი ფენის შემთხვევაში გამშვები მიმართულებით დენის სიმკვრივე, ისე როგორც თხელი ფენის შემთხვევაში, იზრდება ექსპონენციალური კანონით, ხოლო ჩამკეტი მიმართულებით დენის სიმკვრივე ნაჭერობას არ აღწევს, იგი იზრდება $\sqrt{V}$ -ს პროპორციულად.

სრულიად ანალოგიური შედეგები მიიღება იმ შემთხვევაში, როდესაც მეტალი შეხებაშია x ტიპის ნახევარგამტართან. ამ დროს ჩამკეტი მიმართულება გვექნება მაშინ, როდესაც ნახევარგამტარზე მოდებულია უარყოფითი და მეტალზე დადებითი ძაბვა, ხოლო გამშვები მიმართულებითათვის — შებრუნებით. ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი განისაზღვრება იმავე (11.32) და (11.38) ფორმულებით, მხოლოდ უნდა შევცვალოთ $n_0 \rightarrow p_0$ -ით და $V \rightarrow -V$ -თი. ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის გამოყენების დროს დაეუშვით, რომ გარდამავალ ფენაში ყველა დონორი იონიზირებულია და სათანადო ელექტრონები მთლიანად გადასულია ნახევარგამტარიდან მეტალში. ცხადია, ეს დაშვება არ არის სწორი. სინამდვილეში, დონორების მაქსიმალური იონიზაცია გვექნება უშუალოდ $x=0$ წერტილზე, შემდეგ იონიზაციის ხარისხი მცირდება კონტაქტიდან მოშორებით და $x \geq L$ წერტილზე ნულის ტოლი ხდება. ამ ფაქტორების ზეჯაბილიზაცია მოგვცემდა $\varphi(x)$ -- თვის ძალიან რთულ გამოსახულებას. თუმცა, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ეს გარემოება გავლენას ახდენს მხოლოდ არაგამშვები მიმართულებით დენის მნიშვნელობაზე.

არსებობენ აგრეთვე სხვა ფაქტორებიც, რომლებიც ზემოთ მოცემულ თეორიაში არ იყო მხედველობაში მიღებული, მაგალითად, მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტი არასდროს არ არის სრული, ხშირად კონტაქტი გვაქვს ცალკეულ წერტილებში. ნახევარგამტარის ზედაპირზე ყოველთვის გვაქვს გარკვეული რაოდენობით ნაწილობრივ იონიზირებული ადსორბირებული ატომები და სხვ. რომლებიც გარკვეულ გავლენას ახდენენ ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელზე. მართლაც, თუ n ნახევარგამტარის ზედაპირზე გვაქვს უარყოფითი მუხტები, შექმნილი ზედაპირზე ადსორბირებული ატომების იონიზაციის შედეგად, მაშინ ეს ზედაპირული უარყოფითი მუხტები თავისი ველით ნახევარგამტარის ელექტრონებს გააწვევენ მოცულობის შიგნით და გააღარიბებენ ელექტრონებით ზედაპირის მახლობელ ფენას, ისე როგორც ამას ადგილი ჰქონდა მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტის დროს. თუ ახლა ასეთი ზედაპირული მუხტების შემცველი ნახევარგამტარი იმყოფება მეტალთან შეხებაში, მაშინ ბარიერის სიმაღლე

$\varphi_0 \neq \chi_1 - \chi_1$, არამედ დამოკიდებული იქნება აგრეთვე ზედაპირული უარყოფითი მუხტების სიმკვრივეზე. შესაძლებელია მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტური ველი სრულებით არ იჭრებოდეს ნახევარგამტარის მოცულობაში და ლოკალიზებული იყოს თხელ ფენაში სისქით $\sim 10^{-7}$ სმ, რომელიც ელექტრონებისათვის არავითარ დაბრკოლებას არ წარმოადგენს, ჩამკეტი ფენა მთლიანად შეიქმნება ზედაპირული მუხტებით და ამრიგად, ბარიერის სიმაღლე დამოკიდებული არ იქნება χ_2 და χ_1 -ზე, იგი მთლიანად განისაზღვრება ზედაპირული მუხტების სიმკვრივით. მაგრამ რა მიზეზებითაც არ უნდა შეიქმნას ჩამკეტი ფენა, დენის გასწორება ხდება ამ ჩამკეტ ფენაზე, ამიტომ ზემოთ მოცემული ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის თეორია ძალაში რჩება ამ შემთხვევაშიც.

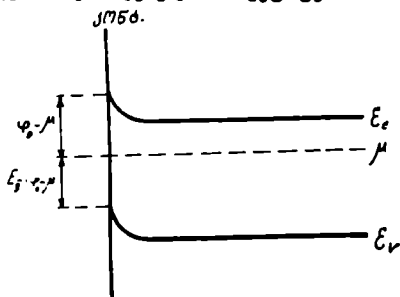
მეტალის n ან p ტიპის ნახევარგამტართან კონტაქტის განხილვის დროს ჩვენ მხედველობაში ვღებულობდით მხოლოდ ერთი ტიპის დენის მატარებლებს—ელექტრონებს ან ხვრელებს. სინამდვილეში კი ნახევარგამტარში გვაქვს როგორც ელექტრონები ისე ხვრელები. მაგალითად, n ტიპის ნახევარგამტარში ძირითადი მატარებლებია ელექტრონები, ხოლო ხვრელები—არაძირითადი. ასევე p ტიპის ნახევარგამტარში ძირითადი მატარებლებია ხვრელები, ელექტრონები კი—არაძირითადი. ძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია ბევრად აღემატება არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაციას, ამასთან

$$np = n_i^2,$$

სადაც n_i —ინვერსიული სიმკვრივეა. თანახმად ამ ფარდობისა, ძირითადი მატარებლების კონცენტრაციის გაზრდით არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია სათანადოდ მცირდება. შესაძლებელია ჩამკეტ ფენაში ძირითადი და არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია ერთმანეთს გაუტოლდეს. მართლაც, უშუალოდ კონტაქტთან ძირითად და არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია განისაზღვრება შემდეგი ფორმულებით:

$$n_1 = N_1 e^{-\frac{\varphi_0 - \mu}{kT}}$$

$$p_1 = N_2 e^{-\frac{E_g - \varphi_0 + \mu}{kT}},$$



ნახ. 104ა

სადაც $\varphi_0 - \mu$ არის მანძილი ფერმის დონიდან გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირამდე, ხოლო $E_g - (\varphi_0 - \mu)$ —მანძილი ფერმის დონიდან ვალენტური ზონის ზედა ნაპირამდე (ნახ. 104ა).

თუ მხედველობაში არ მივიღებთ ხერელებისა და ელექტრონების ეფექტურ მასათა შორის განსხვავებას ($N_e \simeq N_n$), მაშინ ძირითადად არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაციის განტოლება გვაძლევს

$$\varphi_0 - \mu = E_g + \mu - \varphi_0,$$

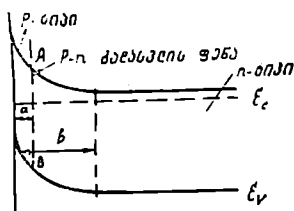
აქედან

$$\varphi_0 = \frac{E_g}{2} + \mu.$$

Ge-თვის $E_g = 0,78 \text{ eV}$, თუ ავიღებთ $n_0 = N_d = 10^{18} \text{ სმ}^3$ და $T = 300^\circ$, მაშინ $-\mu = kT \ln \frac{N_c}{N_d} \simeq 0,2 \text{ eV}$ და $\varphi^0 = 0,19 \text{ eV}$.

მაშასადამე, როდესაც $\varphi_0 - \mu > E_g + \mu - \varphi_0$ ანდა $\varphi_0 > \frac{E_g}{2} + \mu = 0,19 \text{ eV}$,

მაშინ კონტაქტიდან $x = a$ მანძილზე მოშორებით ძირითად და არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია ერთმანეთს გაუტოლდებიან (ნახ. 104ბ, AB ფენა), ე. ი. $\varphi(a) - \mu = E_g + \mu - \varphi(a)$. მაშინ $x < a$ წერტილებში



ნახ. 104 ბ.

ხერელების კონცენტრაცია მეტია ელექტრონების კონცენტრაციაზე, ამიტომ ამ უბანზე გამტარებლობა გახდება p ტიპის. $x > a$ წერტილებში ელექტრონების კონცენტრაცია მეტია ხერელების კონცენტრაციაზე, ამიტომ გამტარებლობა რჩება n ტიპისა. მაგრამ $x = a$ წერტილზე $p_1 = n_1 = n_i$, სადაც n_i ინვერსიული კონცენტრაციაა, რო-

მელიც ეთანადება ნიშნულის საკუთარ გამტარებლობას, ამიტომ ამ ფენის ელექტრული წინააღმდეგობა მაქსიმალურია. $x = a$ წერტილიდან $x = b$ წერტილამდე ელექტრონების კონცენტრაცია (ძირითადი მატარებლებისა) იზრდება n_i -დან $n_0 = N_d$ -მდე. შესაბამისად ამისა, წინააღმდეგობა ეცემა და უტოლდება დონორული მასალის წინააღმდეგობას. ზემოთ მოყვანილ გარდამავალ ფენას, რომელსაც $p-n$ გადასვლის ფენას უწოდებენ, დენის მატარებელთა კონცენტრაციის შემცირების გამო ბევრად უფრო მეტი ელექტრული წინააღმდეგობა აქვს, ვიდრე კრისტალის დანარჩენ ნაწილს. ამიტომ, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, ასეთი $p-n$ გადასვლის ფენა შეიძლება გამოყენებული იქნეს დენის გასწორებისათვის.

ვინაიდან ნახევარგამტარულ ხელსაწყოებში ძირითადად გამოყენებულია $p-n$ გადასვლის ფენა, ამიტომ შემდეგ პარაგრაფში მოცემული იქნება $p-n$ გადასვლის მიღების სხვადასხვა საშუალებები და მასზე დენის გასწორების თეორია.

უპირველეს ყოვლისა განვიხილოთ $p-n$ გადასვლის მიღების რამდენიმე მეთოდი.

1. იღებენ მინარევებისაგან გაწმენდილ სუფთა კრისტალს და დიფუზიის გზით ერთ მხარეზე შეჰყავთ აქცეპტორები, მეორეზე—დონორები. ამრიგად, კრისტალის ერთ მხარეზე გვექნება ელექტრონული და მეორეზე ხვრელური გამტარებლობა. ამ ორა სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობათა უბნებს შორის მდებარეობს $p-n$ გადასვლის ფენა.

2. იღებენ კრისტალს, რომლის მთელ სიგრძეზე თანაბრად არიან გაწიწვებული N_d დონორები. შემდეგ, ერთ მხარეზე დიფუზიის გზით შეჰყავთ აქცეპტორები, რომელთა კონცენტრაცია $N_A \gg N_d$. ელექტრონული ნახევარგამტარის იმ ნაწილში, სადაც დიფუზიის გზით შეიქრნენ აქცეპტორები, მოხდება დონორების კომპენსაცია და, რადგანაც $N_A \gg N_d$, ამ ნაწილში გვექნება აქცეპტორების სიჭარბე, რის გამოც მას ექნება ხვრელური გამტარებლობა. კრისტალის დანარჩენ ნაწილში გამტარებლობა დარჩება ისევ ელექტრონული. ამ ორი სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობის უბნებს შორის მდებარეობს $p-n$ გადასვლის ფენა.

3. იღებენ (ი) ან (ი) ტიპის ნახევარგამტარს და მასზე აფენენ საწინააღმდეგო გამტარებლობის ტიპის თხელ ფენას. ამ ორი სხვადასხვა გამტარებლობის ფენებს შორის მდებარეობს $p-n$ გადასვლის ფენა.

დამოუკიდებლად იმისა, თუ როგორ იქნება მიღებული $p-n$ გადასვლის ფენა, მასზე წარმოებს დენის გასწორება. ამიტომ ჩვენ ქვემოთ განვიხილავთ იმ ფიზიკურ მოვლენებს, რომელიც ხდება $p-n$ გადასვლის ფენაზე.

ვთქვათ, მონოკრისტალი შედგება ორი სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობის უბნებისაგან, რომლებიც გამოყოფილია ერთმანეთისაგან $x=0$ სიბრტყით. მაგალითად $x>0$ უბანს ეთანადებოდეს n ტიპის, ხოლო $x<0$ უბანს p ტიპის გამტარებლობა.

შემოვიტანოთ შემდეგი აღნიშვნები:

N_A —აქცეპტორების კონცენტრაცია p უბანზე,

N_d —დონორების კონცენტრაცია n უბანზე,

p_p —ხვრელების კონცენტრაცია p უბანზე (ძირითადი მატარებლები),

p_n —ხვრელების კონცენტრაცია n უბანზე (არაძირითადი მატარებლები),

n_n —ელექტრონების კონცენტრაცია n უბანზე (ძირითადი მატარებლები),

n_p —ელექტრონების კონცენტრაცია p უბანზე (არაძირითადი მატარებლები).

როგორც ვიცით, ძირითადი და არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაციის ნამრავლი მინარევებზე დამოკიდებული არ არის და უდრის ინვერსიული კონცენტრაციის კვადრატს.

$$p p n_p = n_n p_n = n_i^2,$$

სადაც

$$n_i = \sqrt{N_v N_c} e^{-E_g/2kT}$$

წარმოადგენს სუფთა ნიმუშის დენის მატარებელთა კონცენტრაციას $n = p = n_i$ Ge-თვის, ოთახის ტემპერატურის მახლობლად, $n_i \simeq 10^{13}$ სმ⁻³.

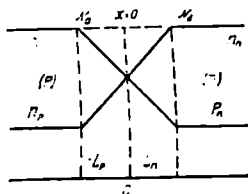
განვიხილოთ $N_A = N_d$ (სიმეტრიული გადასვლის შემთხვევაში), მივიღოთ, რომ მოცემულ ტემპერატურაზე ყველა დონორი და აქცეპტორი იონიზირებულია, ე. ი. $p_p = N_A$ და $n_n = N_d$ ($p_p = n_n$), ამ შემთხვევაში არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია ორივე უბანზე იქნება

$$n_p = p_n = \frac{n_i^2}{n_n}.$$

სიმარტივისათვის დავუშვათ, რომ $N_A = N_d \simeq 10^{16}$ სმ⁻³, მაშინ არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია იქნება

$$n_p = p_p = 10^{10} \text{ სმ}^{-3}.$$

მაშასადამე, n უბნიდან p უბანზე გადასვლისას ელექტრონების კონცენტრაცია ეცემა 10^{16} სმ⁻³-დან 10^{10} სმ⁻³-მდე. ხვრელების კონცენტრაცია

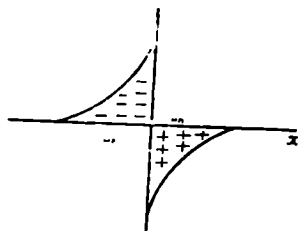


ნახ. 105.

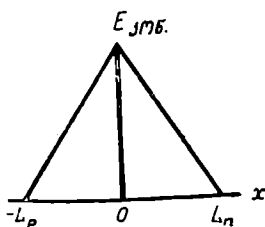
ცია p უბნიდან n უბანზე გადასვლისას ასეთივე სიდიდით ეცემა. ცხადია, რომ ელექტრონების (ხვრელების) ასეთი ცვლილება ერთი უბნიდან მეორე უბანზე გადასვლისას ხდება არა ნახტომისებურად, არამედ თანდათანობით, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 105-ზე. გადასვლის ფენის სისქე $L = L_n + L_p$. $x=0$ სიბრტყეზე ძირითად და არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია ერთმანეთის ტოლია და

უდრის ინვერსიულ კონცენტრაციას, ე. ი. ეს ფენა ხასიათდება საკუთარი გამტარებლობით, რომელიც რამდენიმე რიგით ნაკლებია, ვიდრე n უბნის გამტარებლობა. $0 < x < L_n$ არეში ელექტრონების (ძირითადი მატარებლების) კონცენტრაცია ეცემა n_n -დან n_i -მდე, ამიტომ ამ უბნის გამტარებლობა ბევრად ნაკლები იქნება, ვიდრე (n) უბნის გამტარებლობა. ასევე, $-L_p < x < 0$ არეში კონცენტრაცია ხვრელებისა ეცემა p_p -დან n_i -მდე, ამიტომ ამ უბნის ხვრელური გამტარებლობა ბევრად ნაკლები იქნება (p) უბნის ხვრელურ გამტარებლობასთან შედარებით. $x \geq L_n$ არეში ელექტრონების კონცენტრაცია უდრის იონიზირებული დონორების კონცენტრაციას, ამიტომ მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე $\rho = 0$. $0 < x < L_n$ არეში ელექტრონების კონცენტრაცია ეცემა n_n -დან n_i -მდე. ამ არეში იონიზირებული დონორების დადებითი მუხტები კომპენსირებულია აღარ

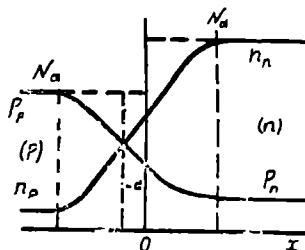
იქნება ელექტრონების უარყოფითი მუხტებით, ამიტომ ამ არეში გვექნება დადებითი მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე, რომელიც მაქსიმალურია $x=0$ სიბრტყეზე და უდრის ნულს $x \geq L_n$ წერტილებში. სრულიად ანალოგიური სურათი გვაქვს $-L_p < x < 0$ არეში. აქ აქცეპტორების კონცენტრაცია ეცემა p_p -დან n_i -მდე, ამიტომ დენის ძირითადი მატარებლების შემცირების გამო აქცეპტორების უარყოფითი მუხტები კომპენსირებული აღარ იქნება ხვრელების დადებითი მუხტებით. უარყოფითი მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე მაქსიმალური იქნება $x=0$ სიბრტყეზე და უტოლდება ნულს $x = -L_p$ სიბრტყეზე. დადებითი და უარყოფითი მთცულობითი მუხტების განაწილება ნაჩვენებია ნახ. 106-ზე. მეორე მხრივ, ცნობილია, რომ, თუ კრისტალის მოცულობის შიგნით გვაქვს მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე, მას შეესაბამება ელექტრული ველი მიმართული დადებითიდან უარყოფითი მუხტისაკენ. ეს ველი ქმნის გარკვეული სიმაღლის ბარიერს ელექტრონებისათვის, რომლებიც გადადიან n არედან p არეში და აგრეთვე ხვრელებისათვის, რომლებიც გადადიან p არედან n არეში. საჭიროა შევნიშნოთ, რომ $p-n$ გარდამავალ ფენაში გაჩენილი დადებითი და უარყოფითი მუხტები ეთანადებიან იონიზირებულ დონორებს და აქცეპტორებს. ისინი უძრავია და ამიტომ დენის გადატანაში მონაწილეობას არ ღებულობენ. ქვემოთ ნაჩვენებია იქნება, რომ მოცულობითი მუხტების



ნახ. 106.



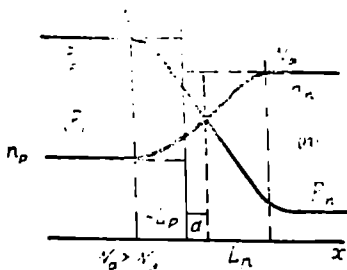
ნახ. 107.



ნახ. 108ა.

მეორე შექმნილი ველი — კონტაქტური ველი, მაქსიმალურია $x=0$ წერტილზე და უტოლდება ნულს $x \geq L_n$ და $-x \geq L_p$ წერტილებში, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 107-ზე.

$N_A = N_d$ (სიმეტრიული გადასვლა) შემთხვევაში მოცულობითი მუხტები ან კონტაქტური ველი ერთი და იგივე სიღრმეში იჭრება როგორც (ii), ისე (p) არეებში (ნახ. 105). $N_A \geq N_d$ შემთხვევაში (არასიმეტრიული გადასვლა) კონტაქტური ველი უფრო მეტად იჭრება ნაკლებად ლეგირებულ არეებში (ნახ. 103 ა, ბ). ამასთან, $N_A > N_d$ შემთხვევაში კონტაქტთან მდებარე $0 < x < a$ არეში დონორულ ნახევარგამტარში ხვრელების კონცენტრაცია მეტია ელექტრონების კონცენტრაციაზე, ამიტომ გამტარებლობა ხვრელური იქნება. ანალოგიურად, $N_d > N_A$ შემთხვევაში კონტაქტთან მდებარე $-a < x < 0$ არეში ხვრელური გამტარებლობის ნახევარგამტარში ელექტრონების კონცენტრაცია მეტია ხვრელების კონ-

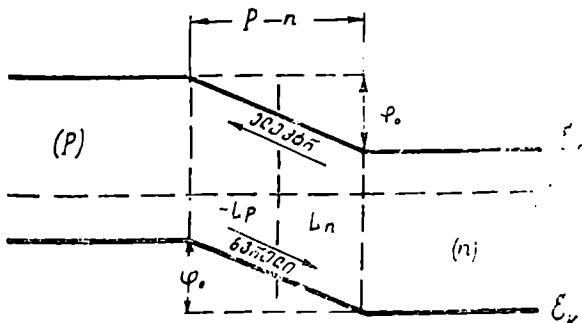


ნახ. 108 ბ.

ცენტრაციაზე, ამიტომ მას ელექტრონული გამტარებლობა ექნება. ისეთ უბნებს, სადაც მაღალი ლეგირების გამო გამტარებლობის ტიპი იცვლება, ინტერსიული ეწოდება.

ამრიგად, როდესაც შეხებაში იმყოფება ორი სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობის უბანი, მათ შორის წარმოიშობა გარდამავალი ფენა ($p-n$ გადასვლის ფენა). ამასთან, კონტაქტთან მდებარე (ii) არე იმუხტება დადებითად, p არე — უარყოფითად. სხვანაირად რომ ვთქვათ, ელექტრონები (ii) არიდან გადადიან (p) არეში და ხვრელება (p) არიდან (ii) არეში და კონტაქტთან მდებარე $L = L_p + L_n$ სისქის არეში ქმნიან მუხტების მოცულობით სიმკვრივეს. ელექტრული მუხტების ასეთი გადანაწილება თავის მხრივ წარმოშობს ელექტრულ ველს, რომელიც მიმართულია n არიდან p არისაკენ. ასეთი ველი ქმნის პოტენციალურ ბარიერს, რომელიც ხელს უშლის ელექტრონების შემდგომ გადასვლას n არიდან p არისაკენ და ხვრელების გადასვლას p არიდან n არისაკენ. ბოლოს, დამყარდება წონასწორობა, რომლის დროსაც ელექტრონებისა და ხვრელების ზემოთ აღწერილი გადანაწილება შეწყდება. წონასწორობის შესაბამის პოტენციალთა სხვაობას უწოდებენ კონტაქტურ პოტენციალს, შესაბამის ველს — კონტაქტურ ველს. n და p ტიპის ნახევარგამტარების კონტაქტზე პოტენციალური ბარიერის წარმოშობა შეიძლება აგრეთვე ავსხნათ ქიმიური პოტენციალის საშუალებით. მართლაც, დონორულ ნახევარგამტარში ქიმიური პოტენციალი (ფერმის დონე) მდებარეობს გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირთან უფრო ახლოს, ვიდრე ვალენტური ზონის ზედა ნაპირთან. ხვრელურ ნახევარგამტარში კი, პირიქით, ქიმიური პოტენციალი

ვალენტური ზონის ზედა ნაპირთან უფრო ახლო მდებარეობს, ვიდრე გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირთან. მეორე მხრივ, ცნობილია, რომ წონასწორობაში, მყოფი სხეულების კიმიური პოტენციალები ერთმანეთის ტოლია. ამიტომ, როდესაც n და p ტიპის ნახევარგამტარები წონასწორობაშია, მათი კიმიური პოტენციალები უნდა გაუტოლდეს ერთმანეთს. ეს მოგვცემს ზონის სათანადო დახრას (ნახ. 109). როგორც ამ ნახაზიდან ჩანს, (n) არეში ელექტრონის მინიმალური ენერგია უდრის E_c -ს, ამიტომ, რომ იგი გადავიდეს (p) არეში, დასჭირდება $\phi_0 = -eV_0$ ბარიერის გადალახვა, სადაც V_0 არის კონტაქტური პოტენციალი. ეს ბარიერი არ არსებობს იმ ელექტრონებისათვის, რომლებიც გადადიან p არიდან n არეში.



ნახ. 109.

სრულიად ანალოგიურად, იგი წარმოადგენს ბარიერს ზერელებისათვის, რომლებიც გადადიან p არიდან n არეში, რადგანაც ზერელებისათვის ენერგია იზრდება ზევიდან ქვევით გადასვლის დროს. ეს ბარიერი არ არსებობს ზერელებისათვის, რომლებიც გადადიან n არიდან p არეში.

კონტაქტური პოტენციალის, ანდა პოტენციალური ბარიერის სიმაღლის განსაზღვრა მეტად რთულია. ამისათვის საჭიროა $p-n$ გადასვლის ფენაში ვიცოდეთ მოცულობითი მუხტების განაწილების კანონი. გამოთვლების გასამარტივებლად მივიღოთ შემდეგი მოდელი: ვთქვათ $0 < x < L$ არეში ყველა დონორი იონიზირებულია და სათანადო ელექტრონები გადასულია (p) არეში. ასევე $-L_p < x < 0$ არეში ყველა აქცეპტორი იონიზირებულია და სათანადო ზერელები გადასულია (n) არეში. გარდა ამისა მივიღოთ, რომ ერთი არიდან მეორეში გადასული ელექტრონები და ზერელები თანაბრად არიან განაწილებული გარდამავალ ფენაში, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 110-ზე. მაშასადამე, მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე გარდამავალ ფენაში მოიცემა შემდეგი სახით:

$$\rho = eN_d = en_n \quad \text{როცა} \quad 0 < x < L_n$$

$$\rho = -e(N_A - N_d) = -ep_p \quad \text{როცა} \quad -L_p < x < 0.$$

აღნიშნულ არეებში $\varphi(x)$ მოინახება პუასონის განტოლებიდან

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{4\pi e^2 n_n}{x} \quad 0 < x < L_n$$

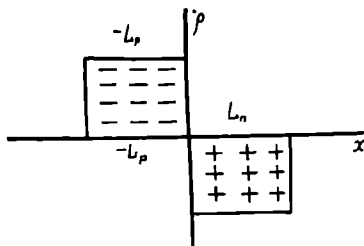
(11.42)

და

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = -\frac{4\pi e^2 p_p}{x} \quad -L_p < x < 0.$$

სადაც x არის კრისტალის დიელექტრიკული მუდმივა.

ჩვენ გვინტერესებს (10.42) განტოლებათა ამოხსნა შემდეგი საწყისი პირობების გათვალისწინებით:



ნახ. 110.

როცა $x \geq L_n$ $\varphi(L) = 0$ და $E = -\frac{1}{e} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_{x=L_n} = 0,$ (11.43)

როცა $x \leq -L_p$ $\varphi(-L_p) = \varphi_0$ და $E = -\frac{1}{e} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_{x=-L_p} = 0.$

ადვილი შესამოწმებელია, რომ საძიებელ ამოხსნას აქვს შემდეგი სახე:

$$\varphi_1(x) = \frac{2\pi e^2 n_n}{x} (L_n - x)^2 \quad 0 < x < L_n$$

(11.44)

და

$$\varphi_2(x) = \varphi_0 - \frac{2\pi e^2 p_p}{x} (L_p + x)^2 \quad -L_p < x < 0.$$

რადგანაც ველის დაძაბულობა უდრის

$$E = -\frac{1}{e} \frac{d\varphi}{dx},$$

ამიტომ, თანახმად (11.44) ფორმულებსა, კონტაქტური ველი მაქსიმალურია $x=0$ წერტილზე, კონტაქტიდან მოშორებით ეცემა წრფივი კანონით და $x=L_n$ და $x=-L_p$ წერტილებში უტოლდება ნულს (ნახ. 107). ვინაიდან ერთი არიდან მეორეში გადასვლისას $\varphi(x)$ ფუნქცია უნდა იცვ-

ლებოდას უწყვეტად, ამიტომ საჭიროა $\varphi_1(x)$ და $\varphi_2(x)$ ფუნქციები შეიკეროს $x=0$ წერტილზე. შეკერვის პირობებია:

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad \text{და} \quad \left(\frac{d\varphi_1}{dx}\right)_0 = \left(\frac{d\varphi_2}{dx}\right)_0. \quad (11.45)$$

თუ (11.45) განტოლებებში შევიტანთ $\varphi_1(x)$ და $\varphi_2(x)$ -ს მნიშვნელობებს, მივიღებთ:

$$L_n n_n = L_p p_p$$

და

$$\varphi_0 = \frac{2\pi e^2}{\kappa} (n_n L_n^2 + L_p p_p^2). \quad (A)$$

ვინაიდან $L_n + L_p = L$ -ს, ამიტომ (A) განტოლებიდან ვღებულობთ:

$$L_n = L \frac{p_p}{n_n + p_p}, \quad L_p = L \frac{n_n}{n_n + p_p}, \quad (11.46)$$

$$\varphi_0 = \frac{2\pi e^2}{\kappa} \frac{n_n p_p}{n_n + p_p} L^2 \quad \text{ან} \quad L = \left(\frac{\kappa \varphi_0}{2\pi e^2} \frac{n_n + p_p}{n_n p_p} \right)^{1/2}. \quad (11.47)$$

დავუშვათ, რომ (p) არე უფრო ძლიერად არის ლეგირებული, ვიდრე (n) არე, ე. ი. $p_p \gg n_n$, მაშინ (11.46) ფორმულიდან ვღებულობთ:

$$L_p \simeq 0 \quad \text{და} \quad L_n \simeq L = \left(\frac{\kappa \varphi_0}{2\pi e^2 n_n} \right)^{1/2}.$$

მაშასადამე, ამ შემთხვევაში კონტაქტური ველი იჭრება ძირითადად (n) არეში—ნაკლებად ლეგირებულ არეში.

თუ დავუშვებთ, რომ $n_n \gg p_p$, მაშინ

$$L_n \simeq 0 \quad \text{და} \quad L_p = \left(\frac{\kappa \varphi_0}{2\pi e^2 p_p} \right)^{1/2}.$$

კონტაქტური ველი ძირითადად იჭრება (p) არეში—ნაკლებად ლეგირებულ არეში.

როდესაც $p \sim n$ გადასვლის ფენაზე მოდებულია გარეგანი V ძაბვა, მაშინ ანალოგიურად მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტია, ბარიერის სიმაღლე გაიზრდება (როდესაც გარეგანი ველი ემთხვევა კონტაქტურ ველს) ანდა შემცირდება (როდესაც გარეგანი ველი მიმართულია კონტაქტური ველის საწინააღმდეგოდ) eV სიდიდით. შესაბამისად, ველის შეჭრის სიღრმე (მოცულობითი მუხტების არე) განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით

$$L = \left(\frac{\kappa}{2\pi e^2} \frac{n_n + p_p}{n_n p_p} (\varphi_0 \mp eV) \right)^{1/2}. \quad (11.48)$$

$eV > 0$ შეესაბამება გამშვებ მიმართულებას

$eV < 0$ „ ჩამკეტ „

ა) თხელი $p-n$ გადასვლის ფენის ვოლტ-ამპერული
მახასიათებელი

თხელი $p-n$ გადასვლის შემთხვევაში $\left(L < \frac{2\varphi_0}{kT} l \right)$ ავით $p-n$

გადასვლის ფენაში შეიძლება მხედველობაში არ მივიღოთ ელექტრონებისა და ხერკლების რეკომბინაცია და აგრეთვე მათი დიფუზური გაბნევა. გამწვები მიმართულებით ($eV > 0$) ხდება ელექტრონების ინექცია (n) არიდან (p) არეში, სადაც ისინი წარმოადგენენ არაძირითად მატარებლებს, მათი კონცენტრაცია საზღვარზე მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$n(-L_p) = n_p e^{eV/kT}. \quad (11.49)$$

ანალოგიურად, $eV > 0$ შემთხვევაში ხდება ხერკლების ინექცია (p) არიდან (n) არეში, სადაც ისინი წარმოადგენენ არაძირითად მატარებლებს, მათი კონცენტრაცია საზღვარზე მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$p(L_n) = p_n e^{eV/kT}. \quad (11.50)$$

მაშასადამე, $eV > 0$ შემთხვევაში $p-n$ გადასვლის საზღვარზე იზრდება არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია. შემდეგ დიფუზიის გზით შედიან მოცულობის შიგნით, სადაც რეკომბინირდებიან ძირითად მატარებლებთან. არაძირითადი მატარებლების ასეთ მოძრაობას ეთანადება დენი გამწვები მიმართულებით. როდესაც $eV < 0$ $p-n$ გადასვლის საზღვარზე, თანახმად (11.49) და (11.50) ფორმულებისა, მცირდება არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია, ამიტომ ამ უბნებში წყვილების (ელექტრონ-ხერკლი) სითბური გენერაცია გადააქარბებს მათ რეკომბინაციას და, რადგანაც კონტაქტური ველი მიმართულია (n) არიდან (p)-კენ, $x = L_n$ საზღვართან სითბური გენერაციის შედეგად წარმოშობილი ელექტრონი ამავე არეში რჩება, ხოლო ხერკლი გადადის (n) არიდან (p) არეში, სადაც ისინი წარმოადგენენ ძირითად მატარებლებს. ასევე $x = -L_p$ საზღვარზე სითბური ფლუქტუაციის შედეგად წარმოშობილი ხერკლი იმავე არეში რჩება, ხოლო ელექტრონი გადადის (p) არედან (n) არეში, სადაც ისინი წარმოადგენენ ძირითად მატარებლებს. ელექტრონებისა და ხერკლების ასეთ მოძრაობას ეთანადება დენი არაგამწვები მიმართულებით. მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტისაგან განსხვავებით, სადაც დენი გადაიტანება ძირითადი მატარებლებით—ელექტრონებით, $p-n$ კონტაქტზე დენი გადაიტანება არაძირითადი მატარებლებით (n) არეში ხერკლებით და (p) არეში—ელექტრონებით. ამასთან, გამწვები მიმართულებით დენის სიდიდე დამოკიდებულია ინექტირებული არაძირითად მატარებელთა რაოდენობაზე და მოცულობის შიგნით რეკომბინაციის სიჩქარეზე. არაგამწვები მიმართულებით კი დენის სიდიდე დამოკიდებულია იმაზე, თუ

ჩამდენად სკარბობს $p-n$ გადასვლის საზღვარზე წყვილების სითბური გენერაცია მათ რეკომბინაციას.

ახლა განვსაზღვროთ $p-n$ გადასვლაზე გამავალი სრული დენი, რომელიც შედგება ელექტრონული და ხერელური დენების ჯამისაგან. ჯერ განვსაზღვროთ ხერელური დენი.

სრული ხერელური დენი ტოლია

$$j_p = e \left(E_n u_p p_n - D_p \frac{dp}{dx} \right) \quad n\text{-არეში} \quad (11.12)$$

$$j_p = e \left(E_p u_p p_p + D_p \frac{dp}{dx} \right) \quad p\text{-არეში}$$

ახელი $p-n$ გადასვლის ფენის შემთხვევაში, თვით $p-n$ ფენაში უგულებელვყოფთ დიფუზურ გაბნევას და ელექტრონებისა და ხერელების რეკომბინაციას. ამიტომ ხერელების რიცხვი, რომელიც გადის $x = L_n$ წერტილში, უდრის ხერელების რიცხვს, რომელიც გადავა $x = -L_p$ წერტილში. ე. ი. (11) და (12) არეებში ხერელური დენებით ერთმანეთის ტოლია

$$j_p(L_n) = j_p(-L_p).$$

ჩადგანაც $p_p \gg p_n$, ამიტომ (11) არეში ხერელური დენი ძირითადად მიიღება ინექტირებული ხერელების დიფუზიით.

$$j_p \simeq -e D_p \frac{dp}{dx}, \quad (11.52)$$

ხოლო (12) არეში ხერელური დენი ძირითადად ომურია

$$j_p \simeq e E_p u_p p_p.$$

თუ გამოვიყენებთ უწყვეტობის პირობას (7.37) $g_i = 0$ შემთხვევაში გვექნება

$$\frac{1}{e} \frac{dj_p}{dx} = - \frac{p - p_n}{\tau_p},$$

თუ მასში ჩავსვამთ j_p -ს მნიშვნელობას (11.52) ფორმულიდან, მივიღებთ:

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = \frac{p - p_n}{l_p^2}, \quad (11.53)$$

სადაც

$$l_p = \sqrt{D_p \tau_p}. \quad (11.54)$$

(11.53) განტოლების ამოხსნა ვეძიოთ შემდეგი სახით:

$$p(x) = A + B e^{-x/l_p} + C e^{x/l_p}.$$

A , B და C კოეფიციენტებს განვსაზღვრავთ შემდეგი საწყისი პირობიდან:

როცა $x \rightarrow \infty$ $p(\infty) = p_n$ და როცა $x = L_n$ $p(L_n) = p_n e^{eV/kT}$, ეს გვაძლევს $A = p_n$ და $B = p_n (e^{eV/kT} - 1) l_p / L_n$, ამრიგად,

$$p(x) = p_n + p_n (e^{eV/kT} - 1) e^{-\frac{x-L_n}{l_p}}$$

ანდა

$$\Delta p(x) = \Delta p(L_n) e^{-\frac{x-L_n}{l_p}}, \quad (11.55)$$

სადაც $\Delta p(x)$ არის ხერელების ჰარბი კონცენტრაცია კონტაქტიდან x მანძილზე, ხოლო $\Delta p(L_n)$ — კონტაქტიდან L_n მანძილზე.

დავუშვათ, რომ $x = L_n + l_p$, სადაც l_p არის მანძილი $p-n$ გადასვლის საზღვრიდან (n) არეში, სადაც, თანახმად (11.55) დამოკიდებულებისა, ხერელების ჰარბი კონცენტრაცია მოცულობაში რეკომბინაციის შედეგად ეცემა e -ჯერ. ამ სიდიდეს უწოდებენ ხერელების დიფუზურ განარბენს. $p-n$ გადასვლაზე გამავალი ხერელური დენი უდრის

$$j_p(L_n) = -e D_p \left(\frac{dp}{dx} \right)_{x=L_n} = \frac{e D_p p_n}{l_p} (e^{eV/kT} - 1). \quad (11.56)$$

სრულიად ანალოგიურად გამოითვლება ელექტრონული დენი

$$j_n(-L_p) = e D_n \frac{dn}{dt} = \frac{e D_n n_p}{l_n} (e^{eV/kT} - 1).$$

სადაც

$$l_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad (11.58)$$

არის ელექტრონის დიფუზური განარბენი.

$p-n$ გადასვლაზე გამავალი სრული დენი შედგება ელექტრონული და ხერელური დენების ჯამისაგან

$$j = j_p(L_n) + j_n(-L_p) = j_s (e^{eV/kT} - 1), \quad (11.59)$$

სადაც

$$j_s = e \left(\frac{D_n n_p}{l_n} + \frac{D_p p_n}{l_p} \right). \quad (11.60)$$

j_s არის არაგამშვები მიმართულებით ნაჯერი დენის მნიშვნელობა ($eV \rightarrow -\infty$).

მაშასადამე, გამშვები მიმართულებით დენის სიმკვრივე იზრდება ექსპონენციალური კანონით

$$j \sim e^{eV/kT},$$

ხოლო არაგამშვები მიმართულებით დენი^ა აღწევს ნაჯერობას (ნახ. 111). თუ (11.60) ფორმულაში შევცვლით D_p და D_n -ს (11.54) (11.58) ფორმულების გამოყენებით, მაშინ

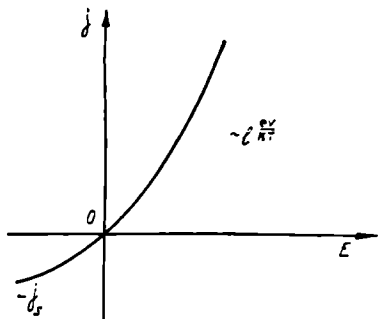
$$j_s = e \left(\frac{l_p}{\tau_p} p_n + \frac{l_n}{\tau_n} n_p \right). \quad (11.61)$$

მაგრამ

$$n_p = n_i^2 / p_p; \quad p_n = n_i^2 / n_n$$

$$n_i \sim e^{-E_g/kT}$$

ამიტომ შეიძლება დავასკვნათ, რომ აკრძალული ზონის სიგანის შემცირებით ანდა ტემპერატურის გადიდებით იზრდება ინვერსიული სიმკვრივე, შესაბამისად იზრდება არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია და, მაშასადამე, იზრდება დენის სიდიდე არაგამშვები მიმართულებით. ტემპერატურის შემცირებით, ანდა აკრძალული ზონის სიგანის გადიდებით მცირდება არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია, ამიტომ მცირდება დენის სიდიდე არაგამშვები მიმართულებით.



ნახ. 111.

თანახმად (11.56) და (11.57) ფორმულებისა, ელექტრონული და ხვრელური დენების შეფარდებისათვის ვღებულობთ

$$\frac{j_n}{j_p} = \frac{D_n n_p l_p}{D_p p_p l_n},$$

მაგრამ აინშტაინის თანაფარდობის საფუძველზე

$$D = \frac{e}{kT} u.$$

ამიტომ

$$\frac{j_n}{j_p} = \frac{u_n n_p l_p}{u_p p_p l_n} = \frac{u_n n_n l_p}{u_n p_p l_n}.$$

ელექტრონებისა და ხვრელების დიფუზიური განაზბენის სიდიდეები დაახლოებით ერთმანეთის ტოლია $l_n \simeq l_p$,

$$\frac{j_n}{j_p} = \frac{\sigma_n}{\sigma_p},$$

ანდა, თუ $u_n \approx u_p$

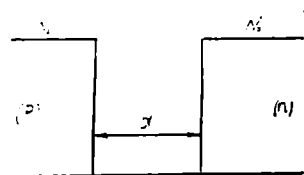
$$\frac{j_n}{j_p} \approx \frac{n_n}{p_p},$$

მაშასადამე, ელექტრონული და ზერელური დენების შეფარდება უდრის (ი) და (ჟ) არეების გამტარებლობათა შეფარდებას, ანდა დაახლოებით დენის ძირითადი მატარებლების კონცენტრაციათა შეფარდებას.

ბ) ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი $p-n$ გადასვლის ფენაში რეკომბინაციის გათვალისწინების შემთხვევაში.

სქელი $p-n$ გადასვლის შემთხვევაში $\left(L \gg \frac{2\tau_0}{kT} \right)$ თვით $p-n$ გადა-

სვლის ფენაში ელექტრონებისა და ზერელეების რეკომბინაციამ შეიძლება არსებითად შეცვალოს ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი. გამოთვლების გასამარტივებლად განვიხილოთ სპეციალური სახის $p-n$ გადასვლა, რომელიც ხორციელდება ძლიერ დიოდებში. სუფთა გერმანიუმში ერთ მხარეზე შეჰყავთ აქცეპტორები დიდი კონცენტრაციით, ხოლო მეორე მხარეზე—დონორები. მათ შორის მოხაზულობა სუფთა გერმანიუმის ფენა (ი), რომელიც ხასიათდება თითქმის საკუთარი გამტარებლობით (ნახ. 112).



ნახ. 112.

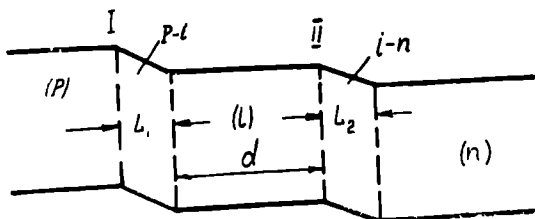
ამ შემთხვევაში გვეჩვენა ორი $p-i$ და $i-n$ გადასვლის არე, რომლებიც დაშორებულნი არიან ერთმანეთისაგან d სისქის (ი) ფენით (ნახ. 113).

$p-n$ გადასვლის სისქე $L = L_1 + L_2 + d$, სადაც L_1 და L_2 არის სათანადოდ $p-i$ და $i-n$ გადასვლის ფენების სისქე. თუ დავუ-

შვებთ, რომ დონორებისა და აქცეპტორების განაწილების ფრონტი საზღვრებზე მკვეთრად ეცემა, მაშინ $p-i$ და $i-n$ გადასვლის ფენები შეიძლება ჩავთვალოთ როგორც თხელი და მხედველობაში არ მივიღოთ ამ ფენებში ელექტრონებისა და ზერელეების რეკომბინაცია. ამ შემთხვევაში $p-n$ გადასვლის ფენა შეიცავს ორ ბარიერს I და II, რომლებიც ერთმანეთისაგან $L \ll d$ მანძილით არიან დაშორებული.

ელექტრონებისა და ზერელეების რეკომბინაციის გამო (ი) არიდან (ი) ფენაში ინექტირებული ელექტრონების მხოლოდ ნაწილი მიაღწევს $p-i$ საზღვრამდე. ასევე (ჟ) არიდან (ი) ფენაში ინექტირებული ზერელეების ნაწილი მიაღწევს $i-n$ საზღვრამდე. ცხადია, რომ ელექტრონების რიცხვი, რომლებიც გადადიან $i-n$ საზღვარზე, უდრის ელექტრონების რიცხვს,

რომლებიც გადადიან $p-i$ საზღვარზე, პლუს (i) ფენაში რეკომბინირებული ელექტრონების რიცხვი. ასევე ხვრელებისათვის: ხვრელების რიცხვი, რომლებიც გადადიან $p-i$ საზღვარზე, ულრის ხვრელების რიცხვს, რომლებიც გადადიან $i-n$ საზღვარზე, პლუს (i) ფენაში რეკომბინირებული



ნახ. 113.

ბული ხვრელების რიცხვი. თუ (i) ფენაში რეკომბინირებული წყვილების რიცხვს ერთ სეკუნდში გავამრავლებთ ელექტრონის მუხტზე, მივიღებთ, ეგრეთ წოდებულ რეკომბინაციულ დენს j_r . ამრიგად, $p-n$ გადასვლაზე გამავალი სრული დენი წარმოადგენს ჯამს ელექტრონული, ხვრელური და რეკომბინაციული დენებისა

$$j = j_{nI} + j_{pII} + j_r. \quad (11.62)$$

$p-n$ გადასვლაზე მოდებული გარეგანი ძაბვის V ნაწილი ეარდება პირველ ბარიერზე V_1 და ნაწილი — მეორე ბარიერზე V_2 , აქასთან, $V = V_1 + V_2$. საკმარისად დიდი ძაბვის შემთხვევაში, როდესაც $n \gg n_i$ და $p \gg p_i$, გარეგანი ძაბვა V თითქმის თანაბრად ნაწილდება ორივე ბარიერზე, ე. ი. $V_1 \simeq V_2 = V/2$.

ჩვენ ვგულისხმობთ, რომ I და II ბარიერი თხელია, ამიტომ j_{nI} და j_{pII} დენებისათვის შეგვიძლია ვისარგებლოთ წინათ მიღებული ფორმულებით თხელი ბარიერისათვის (11.56) და (11.57), ხოლო რაც შეეხება რეკომბინაციულ დენს, იგი გამოითვლება შემდეგნაირად:

თანხმად (7.37) ფორმულისა, ერთ სეკუნდში ერთეულ მოცულობაში რეკომბინირებული ელექტრონების (ხვრელების) რიცხვი ულრის

$$\frac{\Delta n}{\tau_i} = \frac{n - n_i}{\tau_i}.$$

თუ ნიმუშის ფართი ულრის 1 სმ², მაშინ d სისქის (i) ფენაში რეკომბინირებული ელექტრონების რიცხვი იქნება $\frac{(n - n_i)}{\tau_i} d$. თუ ამ უკანასკნელს გავამრავლებთ ელექტრონის მუხტზე, მივიღებთ რეკომბინაციულ დენს

$$j_r = \frac{e(n-n)d}{\tau_1} \quad (11.63)$$

როდესაც (2) ფენის სისქე ბევრად აღემატება დიფუზურ განარბენს l_i -ს, მაშინ (2) ფენის მთელ სიგრძეზე დენის მატარებელთა კონცენტრაცია მუდმივია და უდრის მათ კონცენტრაციას საზღვარზე.

$$n(x) = n(d) = n_n e^{-\frac{\varphi_0 - eV_2}{kT}} = n_{ie} e^{eV_2/kT} = n_{ie} e^{\frac{eV}{2kT}} \quad (11.64)$$

$$p(x) = p = p_p e^{-\frac{\varphi_0 - eV_1}{kT}} = p_{ie} e^{eV_1/kT} = p_{ie} e^{\frac{eV}{2kT}}.$$

ამრიგად, რეკომბინაციული დენისათვის ვლელულობთ

$$j_r = \frac{en_id}{\tau_1} \left(e^{\frac{eV}{2kT}} - 1 \right). \quad (11.65)$$

როგორც ვხედავთ, გამშვები მიმართულებით რეკომბინაციული დენი იზრდება ექსპონენციალური კანონით და ჩამკეტი მიმართულებით აღწევს ნაჯერობას.

§ 4. მუხტური და დიფუზური ბევალობა

როდესაც $p \rightarrow n$ გადასვლაზე მიღებულია გარეგანი ძაბვა V , მაშინ გადასვლის საზღვარზე არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია იზრდება შემდეგი კანონით:

$$\Delta p(L_n) = p_n \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right)$$

და

$$\Delta n(-L_p) = n_p \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right).$$

რადგანაც არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია საზღვარზე მეტია, ვიდრე მოცულობის შიგნით, ამიტომ დიფუზიის გზით ისინი იჭრებიან კრისტალის მოცულობაში და რეკომბინირდებიან ძირითად მატარებლებთან. არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაციის ცვლილება (ანდა ელექტრული მუხტების ცვლილება) საზღვრიდან მოშორებით მოიცემა შემდეგი ფორმულებით:

$$\Delta p(x) = \Delta p(L_n) e^{-\frac{x-L_n}{l_p}}$$

$$\text{და } \Delta n(x) = \Delta n(-L_p) e^{-\frac{x+L_p}{l_n}},$$

სადაც l_p და l_n არის დიფუზური განარბენის სიდიდე, ხვრელებისა და ელექტრონებისათვის სათანადოდ. გარეგანი ველის მოქმედებით მუხტების რაოდენობის ცვლილება ანდა დიფუზური დენის კომპონენტის

ცვლილება n ან p არეებში შეიძლება განვიხილოთ როგორც რაღაც ტევადობის ცვლილება, რომელსაც დიფუზური ტევადობას უწოდებენ.

$$C_{\text{დიფ}} = \frac{dQ}{dV}. \quad (11.66)$$

Q არის მუხტების საერთო რაოდენობა, რომლებიც დიფუზირდებიან n ან p არეებში, ეს უკანასკნელი ტოლია

$$\begin{aligned} Q &= eS \int_{L_n}^{\infty} \Delta p(x) dx = \Delta p(L_n) eS \int_{L_n}^{\infty} e^{-\frac{x-L_n}{l_n}} dx = \\ &= eSe_p \Delta p(L_n) = eSl_p p_n \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right), \end{aligned}$$

სადაც S არის კრისტალის განივი კვეთის ფართი. ამრიგად, დიფუზური ტევადობა

$$C_{\text{დიფ}} = \frac{dQ}{dV} = \frac{e^2 S}{kT} l_p p_n e^{\frac{eV}{kT}}.$$

მეორე მხრივ

$$j = j_s \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right)$$

ანდა

$$i = i_s \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right),$$

სადაც

$$j_s = \frac{eD_p p_n}{l_p} = \frac{el_p p_n}{\tau_p}.$$

საბოლოოდ, დიფუზური ტევადობისათვის (თუ მივიღებთ, რომ ველი ძირითადად იჭრება n არეში) მივიღებთ შემდეგ ფორმულას:

$$C_{\text{დიფ}} = \frac{e}{kT} (i + i_s) \tau_p. \quad (11.67)$$

მაშასადამე, დიფუზური ტევადობა მით მეტია, რაც მეტი დენი გადის $p-n$ გადასვლაზე და რაც მეტია არაძირითად მატარებელთა სიციცხლის ხანგრძლივობა.

$p-n$ გადასვლის ფენა წარმოადგენს მუხტების ორმაგ ფენას, რომელიც იქმნება იონიზირებული დონორებისა და აქცეპტორების უმოდრაო მუხტებით, მუხტების ორმაგი ფენა შეიძლება განვიხილოთ როგორც ბრტყელი კონდენსატორი, რომელიც დამუხტებულია V პოტენციალამდე.

არაგამშვები მიმართულებით გარეგანი V ძაბვის მოდების დროს იზრდება გარდამავალი ფენის სისქე და, მაშასადამე, იზრდება მოცულობითი მუხტების საერთო რაოდენობა. გარდამავალ ფენაში მოცულობითი მუხტების ასეთ ცვლილებას შეიძლება შევეუსაბამოთ გარკვეული ტევადობა, რომელ-საც მუხტურ ტევადობას უწოდებენ. გარდამავალ ფენაში დადებითი (ან უარყოფითი) მუხტების საერთო რაოდენობა მოინახება შემდეგი ფორმულით:

$$Q = eS \int_0^{L_n} N_d^+(x) dx,$$

სადაც N_d^+ არის იონიზირებული დონორების დადებითი მუხტების სიმკვრივე, ცხადია, ეს უკანასკნელი იცვლება რაღაც კანონით კონტაქტიდან მოშორებით. სიმარტივისათვის მივიღოთ § 3-ში განხილული მარტივი მოდელი: $x \leq L_n$ არეში ყველა დონორი იონიზირებულია და სათანადო ელექტრონები გადასულია x არეში, მაშინ

$$Q = SL_n e N_d^+ = e L_n S n_0.$$

ამრიგად, მუხტური ტევადობა

$$C_{\text{მუხტ.}} = \frac{dQ}{dV} = e S n_0 \frac{dL_n}{dV}.$$

მეორე მხრივ

$$L_n = \left(\frac{x(\varphi_0 + eV)}{2\pi e^2 n_0} \right)^{1/2}.$$

ამიტომ, მუხტური ტევადობისათვის საბოლოოდ მივიღებთ შემდეგ გამოსახულებას:

$$C_{\text{მუხტ.}} = S \sqrt{\frac{n_0 x e^2}{8\pi(\varphi_0 + eV)}}. \quad (11.68)$$

ნახევარგამტარული ხელსაწყოები

ამ თავში განხილულია ნახევარგამტარული ხელსაწყოების ძირითადი ტიპები, სადაც გამოყენებულია მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტი ანდა $p-n$ გადასვლა: დიოდები (წერტილოვანი და ბრტყელი), ფოტოდიოდები, სხვადასხვა ტიპის ტრანზისტორები, ფოტოელემენტები და სხვ. აგრეთვე ზოგიერთი ნახევარგამტარული ხელსაწყო, რომელთა მუშაობის პრინციპი დამყარებულია ნახევარგამტარებში მიმდინარე სხვა ფიზიკურ პროცესებზე.

§ 1. წერტილოვანი და ბრტყელი დიოდები

დიოდებს ძირითადად ხმარობენ ცვალებადი დენების გასასწორებლად. ამჟამად არსებობს მრავალი სხვადასხვა კონსტრუქციის დიოდები, რომლებსაც იყენებენ როგორც ძალზე სუსტი, ისე რამდენიმე ასეული კილოვატ სიმძლავრის დენების გასასწორებლად. როგორც ქვემოთ დავინახავთ, ნახევარგამტარულ დიოდებს იყენებენ აგრეთვე კონტურში რხევების გენერაციისა და გაძლიერებისათვის. ნახევარგამტარულ გამასწორებლებს ვაკუუმურ გამასწორებლებთან შედარებით მრავალი უპირატესობა აქვთ. ასე მაგალითად, ნახევარგამტარულ დიოდებს არ სჭირდებათ წინასწარი კვების წყარო, აქვთ საუკეთესო გასწორების თვისება, მარგი ქმედების კოეფიციენტი აღწევს 98 — 99%-ს, აქვთ მცირე წონა და გაბარიტი და ამავე დროს დიდია მათი მომსახურების ვადაც. ამ უპირატესობათა გამო ნახევარგამტარულმა დიოდებმა პრაქტიკულად მწყობრიდან გამოიყვანეს ვაკუუმური დიოდები.

ჯერ კიდევ რადიოტექნიკის განვითარების პირველ ეტაპზე იყენებდნენ წერტილოვან დიოდებს ანდა კრისტალურ დეტექტორებს. აქ დენის გასწორება ხდება კრისტალის (G_e ან N_e -ს) ზედაპირთან წვეტიანი მავთულის შეხების აღვილზე.

მომუშავე ზედაპირის (შეხების ფართის) სიმცირის გამო წერტილოვანი დიოდის გასწორების მახასიათებლები ბევრად უფრო სუსტია, ვიდრე

არაწერტილოვანი დიოდებისა, მაგრამ ეს ნაკლი ნაწილობრივ ანაზღაურებულია იმით, რომ მათ შეუძლიათ მუშაობა ზემაღალ სიხშირეებზე. გამართვის თვისებების გასაუმჯობესებლად ხშირად მიმართავენ ეგრეთ წოდებულ „ფორმოვკას“, რომლის წინაარსი შემდეგში მდგომარეობს: დიოდში იმპულსის სახით ატარებენ რამდენიმე ამპერი სიდიდის დენს. ამ დროს შეხების ადგილზე ძლიერი გახურების გამო G_e ან S_1 -ს მასალა იცვლის გამტარებლობის ნიშანს. სხვანაირად რომ ვთქვათ, შეხების წერტილის მახლობლად წარმოიშობა ნახევრად სფერული $p-n$ გადასვლის ფენა, რომელსაც, როგორც ვიცით, ახასიათებს ბევრად უკეთესი გამართვის თვისება, ვიდრე მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტს. სწორედ ამაში მდგომარეობს წერტილოვანი დიოდის გამართვის თვისებების გაუმჯობესება „ფორმოვკის“ შედეგად. თუ $n-G_e$ -ს ზედაპირთან შეხებაშია მავთულის წვეტი, რომელიც შეიცავს ისეთი ნივთიერების ატომებს, რომელიც $n-G_e$ -ს მიანიჭებს p ტიპის გამტარებლობას, მაშინ „ფორმოვკა“ უფრო ეფექტური ხდება. $p-n$ გადასვლის თეორიის განხილვის დროს ნაჩვენები იყო, რომ, რაც უფრო მცირეა ნიმუშის საკუთარი გამტარებლობა, ე. ი. კონცენტრაცია n_i , მით მეტია დიოდის მუშაობის ტემპერატურული ინტერვალი. მეორე მხრივ, მოცემულ ტემპერატურაზე n_i მცირდება აკრძალული ზონის სიგანის გადიდებით და, რადგანაც S_1 -ს აკრძალული ზონის სიგანე მეტია, ვიდრე G_e -სა, ამიტომ G_e -ს წერტილოვანი დიოდების მუშაობის ტემპერატურული ინტერვალი უფრო დაბალია, ვიდრე S_1 -ს წერტილოვანი დიოდისა.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, წერტილოვან დიოდებს იყენებენ ზემაღალი სიხშირეების გამართვისათვის, სპეციალური დანიშნულების შემთხვევაში. მათი გამოყენება არ შეიძლება რადიომიმღებებში, გამზომ ხელსაწყოებში და სხვ. სადაც დენის ძალა აღემატება რამდენიმე ma -ს. ასეთ შემთხვევებში იყენებენ ბრტყელ დიოდებს, რომლებსაც უყენებენ შემდეგ მოთხოვნებს:

ა) ჰქონდეს მცირე წინააღმდეგობა გამშვები მიმართულებით და დიდი წინააღმდეგობა—ჩამკეტი მიმართულებით,

ბ) ახასიათებდეს კარგი გამართვის თვისება, როგორც ძალიან დაბალ ისე ძალიან მაღალ ძაბვაზე,

გ) მუშაობდეს ტემპერატურის საკმარისად დიდ დიაპაზონში,

დ) ჰქონდეს მცირე გაბარიტი და წონა,

ე) დიდი იყოს მომსახურების ვადა.

ყველა ზემოთ ჩამოთვლილ თვისებებს კარგად აკმაყოფილებს G_e და S_1 -ს ბრტყელი დიოდები, სადაც გამოყენებულია $p-n$ გადასვლა. მიუხედავად იმისა, რომ G_e -ს მასალა უფრო დეფიციტურია, ვიდრე S_1 და გარდა ამისა, S_1 -ს დიოდის მუშაობის ტემპერატურული ინტერვალი უფრო მაღალია, ვიდრე G_e -ს დიოდისა, ამჟამად მეტწილად ხმარებაშია G_e -ს

დიოდები. ეს აიხსნება მხოლოდ იმით, რომ G_e -ს დიოდების დამზადების ტექნოლოგია უფრო კარგად არის დამუშავებული, ვიდრე S_i -ს დიოდისა. როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ამჟამად ხმარებაშია მრავალი სხვადასხვა კონსტრუქციის დიოდები, რომლებიც გამოიყენებიან მცირე, საშუალო და მაღალი სიმძლავრის დენების გამართვისათვის. საშუალო და დიდი სიმძლავრის დენების შემთხვევაში ადგილი აქვს დიდი რაოდენობის სითბოს გამოყოფას, რომელთა თავიდან ასაცილებლად მიმართავენ გაცივების სხვადასხვა საშუალებებს, რომელთა აღწერაზე აქ არ შევჩერდებით. მაღალი სამუშაო ძაბვის მისაღებად დიოდებს აერთიანებენ მიმდევრობით. ამ შემთხვევაში აუცილებელია შემდეგი გარემოების გათვალისწინება. $p-n$ გადასვლის თეორიის განხილვის დროს ნაჩვენები იყო, რომ გამართვისთვის მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული ანდა შემოსაზღვრულია არაგამშვები მიმართულებით $p-n$ გადასვლის წინააღმდეგობაზე. ეს უკანასკნელი კი იზრდება n -ის შემცირებით, ე. ი. აკრძალული ზონის სიგანის გადიდებით (რაც მეტია ჩამკეტი მიმართულებით $p-n$ გადასვლის წინააღმდეგობა, მით მეტი იქნება გამრღვევი ძაბვის მნიშვნელობა და, მაშასადამე, მით მეტ ძაბვაზე შეუძლია მუშაობა დიოდს. G_e -თვის გამრღვევი ძაბვა შეადგენს 100 — 200 ვ. S_i -თვის 1000 — 1500 ვ. ამიტომ ყოველი დიოდის მუშაობა შემოზღუდულია ძაბვის გარკვეული მნიშვნელობით (რომელიც ნაკლებია გამრღვევ ძაბვაზე).

სამუშაობად, ამჟამად დამუშავებული დიოდების დამზადების ტექნოლოგია საშუალებას არ იძლევა მივიღოთ ზუსტად განმეორებადი შედეგები, ამიტომ სხვადასხვა დიოდების ერთი და იმავე სერიის შემთხვევაშიც $p-n$ გადასვლის წინააღმდეგობა ჩამკეტი მიმართულებით ერთმანეთისაგან განსხვავდებიან 5—10-ჯერ. დიოდების მიმდევრობითი ჩართვის დროს გარეგანი ძაბვა დიოდებზე განაწილდება დიოდის წინააღმდეგობის პროპორციულად. ამიტომ იმ დიოდზე, რომლის შინაგანი წინააღმდეგობა უდიდესია, მოვა მეტი ძაბვა, რის შედეგად შეიძლება იგი გაიბრუნეს. როგორც კი ეს დიოდი მწყობრიდან გამოვა, გარეგანი ძაბვა გადანაწილდება დანარჩენ დიოდებზე, ამ დროს თითოეულ დიოდზე ძაბვა მეტი იქნება, ვიდრე წინა შემთხვევაში, ამიტომ შესაძლებელია მორიგი დიოდი გამოვიდეს მწყობრიდან და ა. შ. ამ გარემოების თავიდან ასაცილებლად აწარმოებენ ცალკეული დიოდების შუნიტირებას იმ გაანგარიშებით, რომ თითოეულ დიოდზე მიღებული ძაბვის სიდიდე არ იყოს დამოკიდებული მის შინაგან წინააღმდეგობაზე.

გამოკვლევები გვიჩვენებენ, რომ ნახევარგამტარული დიოდებისთვის არსებითად იცვლება მცირე ხანგრძლივობის იმპულსების მოქმედების შემთხვევაში. ამ დროს ჩამკეტი მიმართულებით წინააღმდეგობა მცირდება სტაციონარულ რეჟიმში მომუშავე დიოდის წინააღმდეგობასთან შედარებით. სურათი ისეთია, თითქოს გამშვები მდგომარეობიდან არაგამშვებ

მდგომარეობაში დიოდის გადართვის დროს დიოდი ვერ ასწრებდეს ჩაქცევას. ეს გარემოება დაკავშირებულია $p-n$ გადასვლის სპეციფიკურ მუშაობასთან და წარმოადგენს ე. წ. მუხტების დაგროვების ეფექტის გამოვლინებას.

გამყვები მიმართულებით დენის ჩართვისას $p-n$ გადასვლის საშუალებით ზდება დენის მატარებელთა ინექცია იმ არეებში, სადაც ისინი წარმოადგენენ არაძირითად მატარებლებს. ამრიგად, $p-n$ გადასვლის საზღვარზე იზრდება არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია, რომლებიც დიფუზიის გზით შედიან მოცულობაში და იქ რეკომბინირდებიან ძირითად მატარებლებთან. დენის მატარებლის ასეთ მოძრაობას ეთანადება დენი გამყვები მიმართულებით. ჩამკეტი მიმართულებით $p-n$ გადასვლის საზღვარზე არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია ეცემა უფრო დაბლა, ვიდრე სითბური წონასწორობის შესაბამისი კონცენტრაცია. ამ დროს სითბური გენერაცია წყვილებისა სჭარბობს მათ რეკომბინაციას, რის შედეგად $p-n$ გადასვლის მაზლობლად დაიწყება წყვილების გენერირება. წარმოშობილი წყვილები გადავლენ იმ არეებში, სადაც ისინი წარმოადგენენ ძირითად მატარებლებს. დენის მატარებელთა ასეთ მოძრაობას ეთანადება დენი ჩამკეტი მიმართულებით. მცირე ხანგრძლივობის იმპულსებით მუშაობის დროს $p-n$ გადასვლის საზღვარზე დაგროვილი არაძირითადი მატარებლები მთლიანად ვერ ასწრებენ მოცულობაში გადასვლას და რეკომბინაციას ძირითად მატარებლებთან. ამიტომ ძიბვის გადართვის დროს — გამყვებიდან არაგამყვები მიმართულებით, $p-n$ გადასვლის საზღვარზე მუხტები გარკვეული რაოდენობით დაგროვდება, რის შედეგად გაიზრდება დენის ძალა არაგამყვები მიმართულებით. იმპულსურ ტექნიკაში მუხტების დაგროვების ეფექტის შესამცირებლად, ანდა თავიდან ასაცილებლად, ხმარობენ შოტკის დიოდებს ანდა დიოდებს გაცხელებულ ელექტრონებზე. შოტკის დიოდების ტექნოლოგია ასეთია: იღებენ საფენად ძლიერად ლეგირებულ ნახევარგამტარს * n^+ . მასზე აფენენ N_i -ს თხელ ფირს, რომლის სისქე $\sim 1 \div 1,5$ მკმ. N_i -ს ფირზე აფენენ მეტალურ ფენას კონტაქტისათვის (საკონტაქტო მასალად გამოყენებულია ოქრო ან მოლიბდენი). N_i -ს ფირის სისქე ისეა შერჩეული, რომ $p-n$ გადასვლის ფენა შეიცავდეს ფირის მეტ ნაწილს. რადგანაც გარეგანი ველი ძირითადად ვარდება $p-n$ გადასვლაზე, ველის დაძაბულობა აღწევს $\sim 10^4$ ვ/სმ-ს.

* თუ n ტიპის ნახევარგამტარის ერთი ნაწილი უფრო ძლიერად არის ლეგირებული, ვიდრე მეორე, მაშინ ელექტრონების ნაწილი გადავა ძლიერად ლეგირებული უბნიდან ნაკლებად ლეგირებულ უბანზე. წონასწორობის დამყარების შემდეგ ამ უბნებს შორის წარმოიშობა გარკვეული სიმაღლის ბარიერი. ამ დროს ძლიერად ლეგირებული უბანი დაიხურება დადებითიდან, რას გამოც ასეთ უბანს აღნიშნავენ n^+ -ით, ხოლო აღნიშნულ ბარიერს $n^+ - n$ -ით. ანალოგიურად, p ტიპის მასალის შემთხვევაში $p^- - p$ -ით აღნიშნავენ ძლიერად ლეგირებულ არე, ხოლო წარმოშობილ ბარიერს $p^- - p$ -ით.

ასეთ ველში ელექტრონები ცხელდებიან და ლებულობენ საკმარის ენერგიას, იმისათვის, რომ გადალახონ $p - n$ გადასვლის ბარიერი. ამრიგად, მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე დენი იზრდება გამშვები მიმართულებით. ამ შემთხვევაში ჩვენ არა გვაქვს არაძირითად მატარებელთა ინექცია გადასვლის ფენაში, ამიტომ მუხტების დაგროვების ეფექტს აღვილი არ ექნება. ასეთ დიოდებში ინერციულობა განისაზღვრება მუხტური ტევადობის სიდიდით და დროის იმ ინტერვალით, რომელიც სჭირდებათ ელექტრონებს გარდამავალი ფენის გარბენისათვის. ეს დრო არ აღემატება 10^{-11} — სექ. ამიტომ შოტკის დიოდებს შეუძლიათ მუშაობა ძალიან მაღალ სიხშირეზე. ჩამკეტი მიმართულებით დენი უმნიშვნელო იქნება, რადგანაც ბარიერის სიმაღლე იზრდება და გარდა ამისა ელექტრონების გაცხელება არ ხდება. შოტკის დიოდების გამრღვევი ძაბვა შეადგენს $10 - 30$ ვ. ასეთი დიოდების მცირე ინერციულობა გვაძლევს გამოყენების დიდ პერსპექტივებს როგორც იმპულსური, ისე მაღალი სიხშირის დანადგარების ტექნიკაში.

დასასრულს, განვიხილოთ რეალური დიოდების მახასიათებლების გადახვევა იდეალური დიოდების მახასიათებლებისაგან. იდეალური დიოდების ვოლტ-ამპერული მახასიათებლების განხილვის დროს მხედველობაში არ იყო მიღებული მრავალი ფაქტორი, რომელთა გათვალისწინება აუცილებელია რეალური დიოდებისათვის. მაგალითად, თხელი $p - n$ გადასვლის შემთხვევაში დენის ძალა გამშვები მიმართულებით იზრდება ექსპონენციალური კანონით (11.38).

$$j = j_s \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right),$$

სადაც $j_s = e \left(\frac{D_p p_n}{L_p} + \frac{D_n n_p}{L_n} \right)$ არის ნაწერი დენის მნიშვნელობა. ამ ფორ-

მულის გამოყენების დროს ნაკულისხმევია, რომ გარეგანი ძაბვა მთლიანად ვარდება $p - n$ გადასვლაზე, რაც არ არის სწორი. რეალურ დიოდებში ძაბვის ნაწილი ვარდება დიოდის დანარჩენ უბანზე — მოცულობაზე. თუ დიოდის მოცულობით წინააღმდეგობას ($p - n$ ფენის წინააღმდეგობის გამოკლებით) აღვნიშნავთ r -ით, მაშინ $p - n$ გადასვლაზე ძაბვის ვარდნა იქნება $V - Jr$, ამიტომ ვოლტ-ამპერული მახასიათებლისათვის მივიღებთ შემდეგ ფორმულას:

$$j = j_s \left(e^{\frac{e}{kT}(V - Jr)} - 1 \right).$$

ეს უკანასკნელი, საკმარისად დადი Jr -ის შემთხვევაში (როდესაც $V \sim Jr$), გვაძლევს დენის ძალის ზრდას არა ექსპონენციალური, არამედ წრფივი კანონის სახით. გარდა ამისა, არსებობს აგრეთვე სხვა მრავალი ფაქტორი, რომლებიც მხედველობაში არ იყო მიღებული (11.38) ფორმულის გამოყენების დროს. მაგალითად: ძალიან დიდ ჩამკეტ ძაბვაზე $p - n$

გადასვლის გვერდით ზედაპირზე შეიძლება ადგილი ექნეს ღენის გაპარვას. გარდა ამისა, მხედველობაში არ იყო მიღებული გადასვლის ფენაში გენერაციული და რეკომბინაციული ღენები. გარდამავალ ფენაში გენერაციული ღენი უღრის $\frac{n_1}{\tau}$, სადაც τ არის ღენის მატარებელთა სი-

ცოცხლის ხანგრძლივობა და n_1 გადასვლის ფენაში საკუთარი გამტარებლობის შესაბამისი კონცენტრაცია. გადასვლის ფენის გარეთ არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია რამდენიმე რიგით ნაკლებია, ვიდრე არაძირითად მატარებელთა კონცენტრაცია გარდამავალ ფენაში. ამიტომ გენერაციულ წვევს ექნება არსებითი მნიშვნელობა თვით გარდამავალ ფენაში. ადვილი საჩვენებელია, რომ მცირე n_1 -ს შემთხვევაში გენერაციული წვერი მეტია, ვიდრე ნაჯერი ღენი j_s . მართლაც, თანახმად ცნობილი დამოკიდებულებისა

$$n_n p_n = p_p \cdot n_p = n_i^2.$$

ვღებულობთ

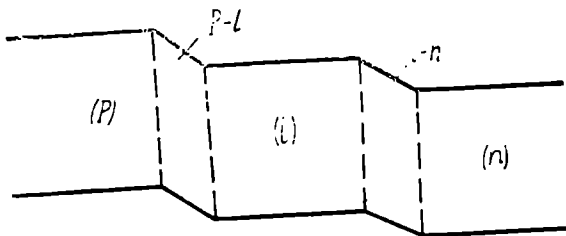
$$j_s = en_i^2 \left(\frac{D_p}{n_n L_p} + \frac{D_n}{p_p L_n} \right).$$

რადგანაც n_n და p_p თითქმის მუდმივი რჩებიან n და p არეებში, ამიტომ ნაჯერი ღენი პროპორციულია n_i^2 -სა, ხოლო გენერაციული ღენი n_1 -სა. მაშასადამე, გენერაციული ღენი არსებითია მცირე n_1 -ს შემთხვევაში. მაგალითად S_1 -ში n_1 უფრო მცირეა, ვიდრე G_e -ში, ამიტომ S_1 -ში გენერაციული წვერი იქნება მეტი, ვიდრე G_e -ში. გარდა ამისა, გენერაციული წვერი დამოკიდებული იქნება აგრეთვე გარდამავალი ფენის მოცულობაზე, რომელიც თავის მხრივ იზრდება ჩამკეტი ძაბვის გადიდებით. გარდა აღნიშნული ეფექტებისა, მაღალ ჩამკეტ ძაბვაზე შეიძლება ადგილი ექნეს ელექტრულ გარღვევას, რომელსაც ზემოთ მოყვანილი ფორმულა არ ითვალისწინებს. არსებობს გარღვევის ორი მექანიზმი: ზონერის და ზეგური გარღვევა. პირველი საფუძვლად უდევს გვირაბულ დიოდებს, ხოლო მეორე — ზეგური გაბნევის დიოდებს, რომელთა მუშაობის პრინციპები გარჩეული იქნება ქვემოთ. გარდა ზემოთ აღნიშნული გარემოებისა, არსებობენ აგრეთვე სხვა ფაქტორებიც, რომლებიც გარკვეულ გავლენას ახდენენ რეალური დიოდების ფოტ-ამპერულ მახასიათებლებზე, რომელთა დეტალურ გარჩევაზე ჩვენ აქ არ შევიჩრდებით.

§ 2. ზეგური გარღვევის დიოდები

როდესაც $p - n$ გადასვლაზე მოდებულია ჩამკეტი მიმართულებით დიდი ძაბვა, მაშინ ამ ფენის ელექტრონებს შეუძლიათ დააგროვონ საკმარისი ენერგია იმისათვის, რომ გადავიდნენ ვალენტური ზონიდან გამტარებლობის ზონაში, ამიტომ ველის გადიდებით ჩამკეტი მიმართულებით

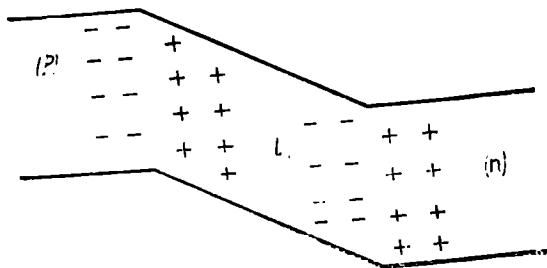
დენის ძალა მატულობს და ერთ გარკვეულ კრიტიკულ ველზე დენის მატარებელთა კონცენტრაცია ანდა დენის ძალა ნახტომისებურად იზრდება. ამ მოვლენას უწოდებენ ელექტრულ გარღვევას. $p-n$ გადასვლის ფენაში გენერირებული ელექტრონ-ხერელები გადადიან იმ არეებში, სადაც ისინი წარმოადგენენ ძირითად მატარებლებს. მაგალითად, $p-n$ ფენაში გენერირებული ელექტრონი გადადის n არეში, ხოლო ხერელები p -ში. ასეთი გენერირებული წყვილების კონცენტრაცია შეიძლება რამდენიმე რიგით აღემატებოდეს მათ წონასწორულ კონცენტრაციას $p-n$ არეში. მაგრამ, მიუხედავად ამისა, მათი კონცენტრაცია ბევრად ნაკლებია n და p არეებში დენის ძირითად მატარებელთა კონცენტრაციაზე. ამიტომ n და p არეების წინააღმდეგობა თითქმის უცვლელი დარჩება, მაშინ როდესაც თვით $p-n$ გადასვლის ფენის წინააღმდეგობა მკვეთრად ეცემა. განვიხილოთ $p-i-n$ დიოდში ელექტრონული გარღვევის სურათი: ამ შემთხვევაში



ნახ. 114

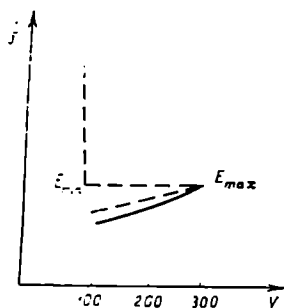
$p-i-n$ გადასვლის არე შედგება ორი $p-i$ და $i-n$ გადასვლის უბნისაგან (ნახ. 114). სწორედ ამ უბნებში წარმოიშობიან მოცულობითი მუხტები. მაგრამ, თუ (i) ფენის სისქე ძალიან თხელია და ამავე დროს $p-n$ გადასვლაზე მოდებულია საკმარისად დიდი ჩამკეტი ძაბვა, მაშინ $p-i$ და $i-n$ გადასვლის არეები მთლიანად დაიკავებენ (i) არეს, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 115-ზე. ამ დროს დენის თავისუფალი მატარებლები მთლიანად გავლენ (i) ფენიდან, გარდა ძალიან თხელი სასაზღვრო ფენისა, სადაც მცირე რაოდენობით დაგროვდება დადებითი მუხტები p არის მახლობლად და უარყოფითი მუხტები n არის მახლობლად, რომლებიც შეიქმნებიან n და p არეებიდან გადმოსული ელექტრონ-ხერელებით. გარდა ამისა, თუ (i) ფენაში გვაქვს იონიზირებული მინარევი დონორები ან აქცეპტორები, მაშინ მოცულობითი მუხტების სიმკვრივე შეიცვლება. ასე მაგალითად: თუ (i) ფენაში გვაქვს იონიზირებული დონორები, მაშინ p არის მახლობლად გაიზრდება დადებითი მუხტების სიმკვრივე, ხოლო n არის მახლობლად შემცირდება უარყოფითი მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე, ამის გამო p არის საზღვარზე ველის სიდიდე

მეტი იქნება, ვიდრე n არის საზღვარზე, ამიტომ ველის მოქმედებით ელექტრონ-ხერელების გენერაცია უპირველეს ყოვლისა, დაიწყება p არის მახლობლად. აქ გენერირებული ელექტრონი იმოძრაავებს n არისაკენ. ეს ელექტრონები მოახდენენ ნაწილობრივ კომპენსაციას p არის მახლობლად მოთავსებულ დადებითი მუხტებისა, რის შედეგად აქ ველის მნიშვნელობა შემცირდება, სამაგიეროდ n არის მახლობლად ველი გაიზარდება, რადგან



ნახ. 115

ნაც p არის საზღვარზე გენერირებული ელექტრონები გადადიან (ი) ფენაში და, მუშასადაშე, n არის საზღვარზე ელექტრონების კონცენტრაციას გაზრდიან. როდესაც გენერირებული ელექტრონების სიმკვრივე დონორების კონცენტრაციაზე მეტი გახდება, მაშინ ველის მაქსიმუმი გადაინაცვლებს მარცხნიდან მარჯვენა მხარეზე, ანლა



ნახ. 116

n არის მახლობლად დაიწყება ელექტრონ-ხერელების ინტენსიური გენერაცია, გენერირებული ხერელები იმოძრაავებენ p არისაკენ და ამრიგად, გაზრდიან (ი) ფენაში დადებითი მუხტების სიმკვრივეს. ეს უკანასკნელი გამოიწვევს (ი) ფენის ელექტრული წინააღმდეგობის შემცირებას და ელვის ერთ გარკვეულ მნიშვნელობაზე (გამარღვევი ველი) დაძაბულობა მკვეთრად დაეცემა E_{max} მნიშვნელობიდან E_{min} მნიშვნელობამდე, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 116-ზე. ასეთი სახის ვოლტამპერული მახასიათებლის არსებობა მი-

გვითითებს უარყოფითი წინააღმდეგობის უბნის წარმოშობაზე, რომელიც შეიძლება გამოყენებული იქნეს რხევების გენერაციისა და გაძლიერებისათვის.

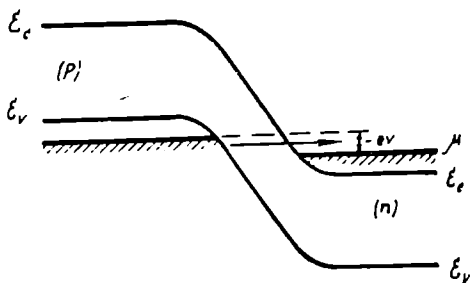
ცდებით დადგენილ იქნა, რომ ზემაღალი სიხშირის დიოდებში უარყოფითი წინააღმდეგობების უბანი წარმოიშობა ელექტრული გარღვევის

მიღწევამდე. ჯამ შემთხვევაში უარყოფითი წინააღმდეგობის უბნის წარმოშობა დაკავშირებულია გარღვევის მიახლოებისას გამრავლების ფენაში, სადაც E მაქსიმალურია, დენის ძალის ჩამორჩენასთან ეელის მიმართ.

§ 3. გვირაბული დიოდები

ცდები გვიჩვენებენ, რომ ჩვეულებრივ ნახევარგამტარულ დიოდებში საკმარისად დიდი უარყოფითი ძაბვის მიყენებისას მიიღება არაგამშვები მიმართულებით დენის ძალის თითქმის ნახტომისებური ზრდა. შეიძლება უჩვენოთ ორი ფიზიკური ეფექტი, რომელიც ხსნის აღნიშნულ მოვლენას.

1. დენის მატარებელთა გაღარიბების გამო არაგამშვები მიმართულებით $p-n$ გადასვლის ფენის გააჩნია ძალზე დიდი ელექტრული წინააღმდეგობა. ამიტომ გარეგანი ძაბვა ძირითადად ვარდება $p-n$ გადასვლის ფენაზე. ეელის დაძაბულობამ შეიძლება მიაღწიოს ძალზე დიდ მნიშვნე-

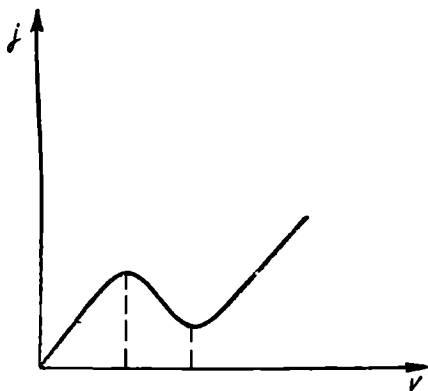


ნახ. 117

ლობას, რომელიც საკმარისია აღნიშნული ფენის გარღვევისათვის. ამ დროს $p-n$ გადასვლის ფენაში მკვეთრად გაიზრდება დენის მატარებელთა კონცენტრაცია, ე. ი. მკვეთრად დაეცემა ალბულის უბნის ელექტრული წინააღმდეგობა, რის შედეგად არაგამშვები მიმართულებით დენის ძალა მკვეთრად გაიზრდება.

2. $p-n$ გადასვლის ფენა წარმოადგენს გარკვეული სიმაღლისა და სიგანის ბარიერს ელექტრონებისათვის, რომლებიც გადადიან n არიდან p არეში და ხვრელებისათვის, რომლებიც გადადიან p არიდან n არეში. უარყოფითი ძაბვის გარკვეულ მნიშვნელობაზე, როდესაც n არეში გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირი აღმოჩნდება p არეში ვალენტური ზონის ზედა ნაპირზე უფრო დაბლა (ნახ. 117). ხელსაყრელი პირობები იქმნება მონდეს გვირაბული გავლა (ენერგიის ცვლილების გარეშე) p არის ელექტრონებისა n არის გამტარებლობის ზონაში. ასეთი მექანიზმის შედეგად დენის სწრაფ ზრდას უწოდებენ ზინერის გარღვევას: ჩვეულებრივ დიოდ-

დებში დენის მატარებელთა კონცენტრაცია არ აღემატება $3 \cdot 10^{17}$ სმ⁻³, ამიტომ, თანახმად (11.47) ფორმულისა, $p - n$ გადასვლის სიგანე იმდენად დიდია, რომ გვირახებული ეფექტი პრაქტიკულად ნულის ტოლია. ამ შემთხვევაში არაგამშვები მიმართულებით დამზერილი დენის სწრაფი ზრდა უნდა მივაწეროთ მხოლოდ ელექტრულ გარღვევას. მაგრამ, თანახმად (11.47) ფორმულისა, ლეგირების ხარისხის გადიდებით შეიძლება გადასვლის ფენის სისქე იმდენად შევამციროთ, რომ გვირახებული ეფექტი შესამჩნევი გახდეს. ამ მიზნით ეზაკმა 1958 წელს დაამზადა G_x -ს მასალი-საგან დიოდი, სადაც ლეგირების ხარისხი, ანდა დენის მატარებელთა კონცენტრაცია აღემატებოდა $\sim 10^{19}$ სმ⁻³. ამ შემთხვევაში $p - n$ გადასვლის სიგანე $\approx 10^{-8}$ სმ. ასეთი სისქის ბარიერი ელექტრონებისათვის

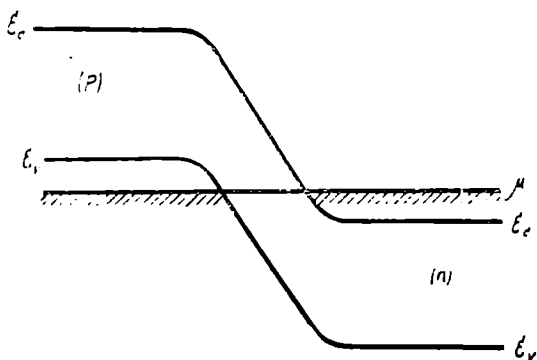


ნახ. 118

თითქმის გამჭვირვალეა. ამიტომ გვირახებული ეფექტი საკმარისად დიდი უნდა ყოფილიყო. ეზაკის ეს წინასწარმეტყველება ბრწყინვალედ დადასტურდა ცდით. მართლაც, ასეთ დიოდში შედარებით მცირე უარყოფით ძაბვაზე, რომელიც გამრღვევ ძაბვაზე ბევრად ნაკლები იყო, არაგამშვები მიმართულების დენის ძალა ბევრად აღემატებოდა დენის ძალის მნიშვნელობას გამშვები მიმართულებით, იმავე სიდიდის დადებით ძაბვაზე. ეს იმას გვიჩვენებს,

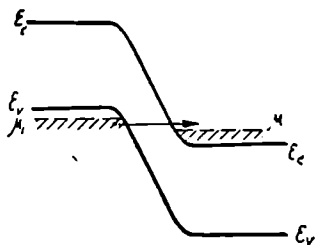
რომ ამ შემთხვევაში საკმე გვაქვს არა ელექტრულ, არამედ ზინერის გარღვევასთან. ასეთი დიოდების ანუ გვირახებული დიოდების ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი არსებითად განსხვავდებოდა ჩვეულებრივი დიოდების ვოლტ-ამპერული მახასიათებლისაგან. გამშვები მიმართულებით მცირე ძაბვებზე დენი მკვეთრად იზრდება, აღწევს მაქსიმუმს, შემდეგ ძაბვის გადიდებით ეცემა თითქმის ნულამდე და ძაბვის გარკვეული მნიშვნელობის შემდეგ ისევ იზრდება ექსპონენციალური კანონით, როგორც ეს ხდება ჩვეულებრივ დიოდებში (ნახ. 118). ასეთი სახის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი მთლიანად აიხსნება გვირახებული ეფექტით. მართლაც, გვირახებულ დიოდებში როგორც n ისე p არე ძლიერად ლეგირებულია, ამიტომ n არეში ელექტრული და p არეში ხვრელური გაზი პრაქტიკულად გადაგვარებული გახები. ეს იმას ნიშნავს, რომ n არეში ფერმის ღონე (ქიმიური პოტენციალი) მდებარეობს გამტარებლობის ზონის შიგნით, ასევე

p არეში ფერმის დონე მდებარეობს ვალენტური ზონის შიგნით (ნახ. 119). წონასწორობის დროს ქიმიური პოტენციალები ორივე ნაწილში ერთი და იმავე დონეზეა. უარყოფითი გარეგანი V ძაბვის მოღებვის დროს n ნაწილში გამტარებლობის ზონის ქვედა ნაპირი დაიწევს ქვევით eV სიდიდეზე (ნახ. 120). ამ დროს შესაძლებელი ხდება p არის სავალენტო ელექტრო-



ნახ. 119

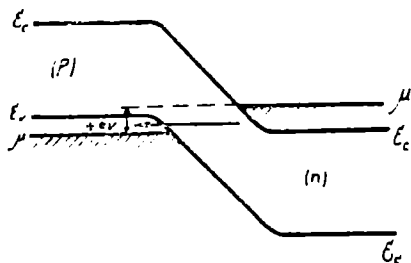
ნების გვირახული გავლა n არეში (ვაკანტურ ადგილებზე). ელექტრონების ასეთ გადასვლებს ეთანადება არაგამშვები მიმართულებით დენის სწრაფი ზრდა — ზინერის გარღვევა. გვირახული გავლა შესაძლებელია აგრეთვე დადებით ძაბვაზედაც. მართლაც, დადებითი ძაბვის მოღებვის შემთხვევაში n არეში ფერმის დონე აიწევს ზევით eV სიდიდეზე, ამიტომ შესაძლებელი ხდება n არის ელექტრონების გვირახული გავლა p არეში (ვაკანტურ ადგილებზე) (ნახ. 121). ელექტრონების გადასვლას ეთანადება დენი გამშვები მიმართულებით. დენის ეს ნაწილი შეესაბამება ნახ. 118-ზე დენის აღმაეღლ ნაწილს. გარეგანი ძაბვის ერთ გარკვეულ მნიშვნელობაზე, როდესაც n არეში ქიმიური პოტენციალი გაუტოლდება p არის ვალენტური ზონის ზედა ნაპირს, გვირახული გავლა შეწყდება. ამ დროს დენის აღმავალი ნაწილი მაქსიმუმზე გავლით დაეცემა თითქმის ნულამდე, ეს ეფექტი ადვილი გასაგებია:



ნახ. 120

მართლაც, კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი ვალენტური ზონის კი-

დებზე იზრდება $\sqrt{E_0 - E}$ -ს პროპორციულად. თვით ვალენტური ზონის კიდეზე კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე ნულის ტოლია. ზონის კიდეზე მიახლოებისას კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე მცირდება, ამიტომ გვირაბული ეფექტი თანდათანობით მცირდება და უტოლდება ნულს თვით ზონის კიდეზე. ძაბვის შემდეგი გადიდებით ქიმიური პოტენციალი უფრო მაღლა იწევს. n არიდან გადმოსული ელექტრონი ხვდება აკრძალულ ზონაში. ამიტომ ასეთი გადასვლები შეუძლებელია. სამაგიეროდ თავს იჩენს პირველი ეფექტი — ბარიერზე გადასვლა, რომელიც დამახასიათებელია ჩვეულებრივი დიოდებისათვის. ამ უბანზე დენი იზრდება ძაბვის გადიდების ექსპონენციალური კანონით. გვირაბულ დიოდებში ვოლტ-ამპერული მახასიათებლებისათვის მიღებული თეორიული ფორმულა საკმარისად კარგად აღწერს ექსპერიმენტულ შედეგებს, მაგრამ არის ერთი გარემოება, რომელიც ართულებს თეორიის შედარებას ექსპერიმენტთან. თეორიულ ფორმულაში, რომლის გამოყენება მისი სირთუ-



ნახ. 121

ლის გამო აქ არ მოგვყავს, გათვალისწინებულია მხოლოდ ორი ტიპის დენი: გვირაბული და დიფუზიური (ბარიერზე გადასვლა). ამიტომ ვოლტ-ამპერული მახასიათებლების მინიმუმის შესაბამის წერტილზე თეორიის მიხედვით, დენი ნულის ტოლი უნდა იყოს, სინამდვილეში კი ნულს არ უტოლდება განსაკუთრებით დაბალ ტემპერატურაზე.

ცდის თანახმად, მაქსიმუმისა და მინიმუმის წერტილებზე დენების შეფარდება დაახლოებით 100-ის ტოლია. მინიმუმის შესაბამის დენს უწოდებენ კარბ დენს. გვირაბული დიოდების დეტალური გამოკვლევები გვიჩვენებენ, რომ კარბი დენების წარმოშობა დაკავშირებულია ღრმა ლოკალური დონეების არსებობასთან. მაგალითად, S_i -ში შეტანილი ოქროს ატომები გვაძლევენ ღრმა ლოკალურ დონეებს აკრძალულ ზონაში. ამიტომ უნდა ვიფიქროთ, რომ n არიდან p არეში გვირაბული გავლა ელექტრონებისა ხდება აღნიშნულ ლოკალურ დონეებზე. მართლაც, თანახმად ცდებისა, S_i -ში ოქროს ატომების კონცენტრაციის გაზრდისას სათანადოდ იზრდება კარბი დენის სიდიდე. ანალოგიური შედეგები მიიღება აგრეთვე იმ შემთხვევაშიაც, როდესაც კრისტალს ვაშუქებთ სწრაფი ელექტრონებით, ნეიტრონებით და სხვ., რომლებიც კრისტალში ქმნიან დამატებით ღრმა ლოკალურ დონეებს. ეს მაგალითები ცალხაზად მიგვითითებენ იმაზე, რომ კარბი დენები ეთანადებიან ელექტრონების გვირაბულ გავლას ღრმა ლო-

კალურ დონეებზე. ამ შემთხვევაში მინარევები დაბალ ტემპერატურაზეც თითქმის მთლიანად იონიზირებულია. ამიტომ ძლიერად ლეგირებულ ნახევარგამტარებში დენის მატარებელთა კონცენტრაცია ტემპერატურის დაწევით აღარ მცირდება, რის შედეგად გვირახულ დიოდებს, ჩვეულებრივი დიოდებისაგან განსხვავებით, შეუძლიათ მუშაობა დაბალ ტემპერატურაზედაც. ძლიერად ლეგირების შემთხვევაში მინარევთა ზონა თითქმის დამთხვეული იქნება ძირითად ზონასთან, რაც ფაქტიურად ეკვივალენტურია აკრძალული ზონის სივანის შემცირებისა. გარდა ამისა, მინარევთა უწყსრიგო განაწილების გამო გვექნება მრავალი დისკრეტული დონეები აკრძალულ ზონაში, რომელთა სიმკვრივე თანდათანობით მცირდება ზონის კიდიდან მოშორებით. სწორედ აღნიშნულ ლოკალურ დონეებზე ხდება გვირახული გადასვლები, რომლებსაც ეთანადებიან ჭარბი დენები.

დენის მაქსიმუმსა და მინიმუმს შორის გვაქვს უბანი, სადაც

$$\frac{dJ}{dV} < 0,$$

ამიტომ ეს უბანი შეიძლება გამოყენებული იქნეს მაღალი სიხშირის რხევების გენერაციისათვის. გვირახული დიოდების სიხშირის ზედა ზღვარი აღემატება 10^{10} ჰერცს.

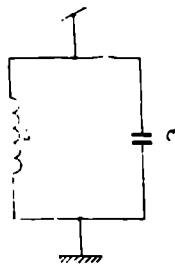
დასასრულს საჭიროა აღვნიშნოთ, რომ გვირახულ დიოდებს აქვს არა მარტო პრაქტიკული მნიშვნელობა, არამედ თეორიულიც, რადგანაც დაბალ ტემპერატურაზე გვირახული დიოდების ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის შესწავლა გვაძლევს მთელ რიგ საინტერესო ინფორმაციებს ნახევარგამტარების ზონურ სტრუქტურაზე.

§ 4. პარამეტრული დიოდები

XI თავის § 4-ში ჩვენ ეუჩვენეთ, რომ $p-n$ გადასვლის ფენა შეიძლება განხილულ იქნეს როგორც ცვალებადი ტევადობის კონდენსატორი. ეს გარემოება, როგორც ქვემოთ დავინახავთ, შეიძლება გამოყენებულ იქნეს რხევების გენერაციისა და გაძლიერებისათვის. ამ პრინციპზე მომუშავე ხელსაწყოებს ეწოდება პარამეტრული გამაძლიერებლები, ხოლო ნახევარგამტარულ დიოდებს, რომელშიც გამოყენებულია პარამეტრული გამაძლიერებლები — პარამეტრული დიოდები. იმისათვის, რომ გავარკვიოთ პარამეტრული გაძლიერების შინაარსი, განვიხილოთ რხევადი კონტური, რომელიც შეიცავს L ინდუქტივობის კოქს და C ტევადობის კონდენსატორს (ნახ. 122). რადგანაც

$$C = \frac{dQ}{dV}, \quad (12.1)$$

კონდენსატორის ფირფიტებზე ძაბვის ცვლილება გამოიწვევს ტევადობის სათანადო ცვლილებას, მაგალითად, თუ ფირფიტაზე მუხტების რაოდენობა უცვლელია, მაშინ ძაბვის გადიდებით ტევადობა მცირდება და პირიქით. ტევადობის ცვლილება შესაძლებელია აგრეთვე მივიღოთ ფირფიტებს შორის მანძილის ცვლილებით. ვთქვათ, კონტურში წარმოშობილია ელექტრული რხევები, მაშინ კონდენსატორის ფირფიტებზე ძაბვის მნიშვნე-



ნახ. 122

ლობა ანდა მუხტების რაოდენობა იქნება პერიოდულად ცვლადი — ძაბვა და მუხტების რაოდენობა ერთდროულად აღწევენ მაქსიმალურ ან მინიმალურ მნიშვნელობებს, დავუშვათ, რომ რაიმე მექანიზმის საშუალებით ფირფიტებს შორის მანძილი იზრდება იმ მომენტში, როდესაც მასზე ძაბვა ანდა მუხტების რაოდენობა მაქსიმალურია. ამ დროს მუხტებს შორის ელექტროსტატიკური მიზიდულობის ძალების დასაძლევად მოგვიხდება გარკვეული სიდიდის ენერგიის დახარჯვა ენერგიის სათანადო წყაროდან. თუ კონდენსატორის ფირფიტებს მიეცემთ საშუალებას დაუბრუნდეს მათ პირვანდელ მდგომარეობას, მაშინ

მუხტებს შორის ელექტროსტატიკური მიზიდვის გამო სისტემას (ენერგიის წყაროს) დაუბრუნდება ენერგიის ის რაოდენობა, რომელიც დახარჯული იყო ფირფიტების დაშორების დროს, მაგრამ, თუ ფირფიტების დაბრუნებას პირვანდელ მდგომარეობაში მოვახდენთ იმ მომენტში, როდესაც მასზე ძაბვა ანდა მუხტების რაოდენობა ნულის ტოლია, მაშინ ენერგიის გამოყოფა არ მოხდება და ფირფიტების გაწევაზე დახარჯული ენერგია დარჩება რხევად კონტურში ელექტრული ენერგიის სახით. ამრიგად, თუ კონდენსატორის ფირფიტებს პერიოდულად გავწევთ იმ მომენტებში, როდესაც მასზე ძაბვა აღწევს მაქსიმალურ მნიშვნელობას და პერიოდულად დავაბრუნებთ პირვანდელ მდგომარეობაში იმ მომენტებში, როდესაც მასზე ძაბვა ნულის ტოლია, მაშინ რხევად კონტურს გარეგანი წყაროდან პერიოდულად გადაეცემა ენერგია, რის შედეგად მივიღებთ კონტურში რხევის გაძლიერებას. ნახ. 123-ზე მოცემულია კონტურის ფირფიტებზე ძაბვის ცვლილება დროის მიხედვით (ა), აქვე მოცემულია ტევადობის ცვლილება დროის მიხედვით (ბ). როგორც ვხედავთ, ტევადობის ცვლილების სიხშირე ორჯერ აღემატება გასაძლიერებელი სიგნალის (კონდენსატორზე მოდებული ძაბვის V_c) სიხშირეს.

ასეთი სახის გაძლიერების პრაქტიკული განხორციელებისათვის იყენებენ $p - n$ გადასვლას, რომლებზედაც მოდებულია საკმარისად დიდი ჩამოკეტი ძაბვა. გადასვლის ფენის სიგანე განისაზღვრება (11.45) ფორმულით.

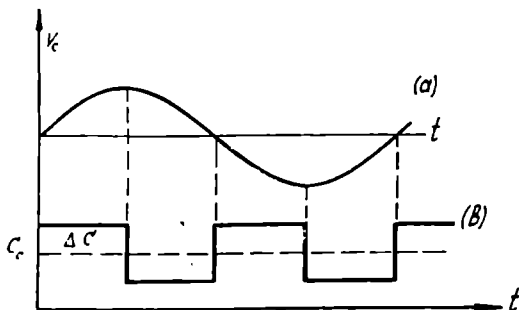
მეორე მხრივ, $p - n$ გადასვლის ფენა შეიძლება განხილული იქნეს როგორც ბრტყელი კონდენსატორი, ამიტომ მისი ტევადობა

$$C = \frac{xS}{4\pi L_n},$$

სადაც x არის გარემოს დიელექტრიკული მუდმივა და S —ფირფიტის ფართი (ვთქვათ $S=1$ სმ²), თუ L_n -ის მნიშვნელობას შევიტანთ (9.26) ფორმულიდან, მივიღებთ

$$C = \left(\frac{e x n_n}{8\pi(\varphi_0 + eV)} \right)^{1/2}. \quad (12.2)$$

თანახმად ამ ფორმულისა, $p-n$ გადასვლის ტევადობა დამოკიდებულია მასზე მოდებული ძაბვისაგან. ეს გარემოება შეიძლება განხილული იქნეს როგორც წრედის არაწრფივი ელემენტი და გამოყენებული იქნეს ზემა-



ნახ. 123

ღალი სიხშირეების გასაძლიერებლად. ამ მიზნით, $p-n$ გადასვლაზე, გარდა მუდმივი ჩამკეტი V_0 ძაბვისა, მოდებულია აგრეთვე ცვალებადი ძაბვა $\tilde{V}$, ძაბვის სპეციალური გენერატორისაგან (დამტენი გენერატორი), რომლის სიხშირე ორჯერ აღემატება გასაძლიერებელი სიგნალის სიხშირეს. ამრიგად, დამტენი ძაბვა (გენერატორი) წარმოადგენს პარამეტრული გამაძლიერებლის კვების წყაროს. ენერგიის ამ გარეგანი წყაროს საშუალებით იცვლება კონტურის რეაქტიული წინააღმდეგობა. მაგრამ, რადგანაც სუფთა რეაქტიულ ელემენტს არ გააჩნია საკუთარი ხმაური, ამიტომ პარამეტრული გამაძლიერებლის საკუთარი ხმაური მინიმალურია.

ჩვენ ზემოთ განვიხილეთ ერთკონტურიანი პარამეტრული გამაძლიერებელი, არსებობს აგრეთვე ორკონტურიანი პარამეტრული გამაძლიერებელი. მაგრამ უპირველეს ყოვლისა, განვიხილავთ ერთკონტურიანი პარამეტრული გამაძლიერებლის გამარტივებულ თეორიას.

გამოვთვალოთ ენერგიის ის რაოდენობა, რომელიც შეაქვს დამტენ გენერატორს რხევად კონტურში ერთი პერიოდის განმავლობაში.

C ტევადობის კონდენსატორის ელექტრული ენერგია

$$W_c = \frac{CV^2}{2} = \frac{q^2}{2C}.$$

q არის მუხტების რაოდენობა კონდენსატორის ფირფიტებზე. თუ ტევადობის ცვლილებას აღვნიშნავთ ΔC -თი ფირფიტების ერთხელ გაწევის დროს, მაშინ რხევადი კონტურის ენერგია გაიზრდება

$$\frac{V^2 \Delta C}{2} = \frac{q^2}{2C_0^2} \cdot \Delta C$$

სიდიდით, სადაც C_0 არის ტევადობის საწყისი მნიშვნელობა.

ერთ პერიოდში რხევად კონტურს გადაეცემა ოთხჯერ მეტი ენერგია, ვინაიდან პერიოდში ორჯერ ხდება ენერგიის გადაცემა კონტურზე. ამასთან, თითოეული გადაცემის დროს ტევადობა იცვლება $2\Delta C$ -ით. ამრიგად

$$\Delta W_c = 4 \cdot \frac{q^2}{2C_0^2} \Delta C$$

ანდა

$$\Delta W_c = 4W_{c_0} \cdot m, \quad (10.3)$$

სადაც

$$W_{c_0} = \frac{q^2}{2C_0} \quad \text{და} \quad m = \frac{\Delta C}{C_0}.$$

m -ს ეწოდება ტევადობის მოდულაციის კოეფიციენტი.

ამრიგად, ენერგია, რომელიც გადაეცემა რხევად კონტურს ერთი პერიოდის განმავლობაში, პირდაპირპროპორციულია ტევადობის მოდულაციის კოეფიციენტისა და კონდენსატორის საწყისი ენერგიის ნამრავლისა. ცხადია, ანალოგიური სურათი მიიღება იმ შემთხვევაში, როდესაც ტევადობის მოდულაცია წარმოებს სინუსოიდალური კანონის მიხედვით. ამ შემთხვევაში, ნაცვლად (10.3) ფორმულისა, მიიღება

$$\Delta W_c = \pi m W_{c_0}. \quad (12.4)$$

მაშასადამე, გარეგანი ენერგიის წყაროს საშუალებით (ფაზათა თანაფარდობის ზუსტად დაცვის პირობებში) დიოდის ტევადობის სიხშირის ცვლილებით შესაძლებელია კონტურში აღძრული რხევების გაძლიერება.

წარმოვიდგინოთ, რომ დამტენ ძაბვასა და გასაძლიერებელ სიგნალს შორის ფაზათა სხვაობა უდრის $\pi/4$ -ს. სხვანაირად რომ ვთქვათ, კონდენსატორის ფირფიტების გაწევა ხდება მაშინ, როდესაც ფირფიტებზე ძაბვა ნულის ტოლია და დაბრუნდება საწყის მდგომარეობაში, როდესაც მასზე ძაბვა მაქსიმალურია. ამ დროს დამტენი გენერატორიდან არ მოხდება ენერგიის გადაცემა კონტურზე. პირიქით, მუხტების ელექტროსტატიკური მიზიდულობის ძალები შეასრულებენ მუშაობას, ე. ი. რხევადი კონტუ-

რიდან გამოიყოფა ენერგია. ამ შემთხვევაში, პარამეტრული გაძლიერების პროცესი შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც უარყოფითი ქრობის ანდა უარყოფითი წინააღმდეგობის შეტანა კონტურში, რომელიც კომპენსაციას უკეთებს საკუთარ დანაკარგს. თუ უარყოფითი ქრობა თავის სიდიდით უდრის ანდა აღემატება კონტურში არსებულ ქრობის სიდიდეს, მაშინ ასეთ კონტურში შეიქმნება პირობები რხევების გენერაციისათვის. ცხადია, დამტენი გენერატორის სიმძლავრის გადიდებით გაიზრდება კონტურში შეტანილი უარყოფითი ქრობის ანდა უარყოფითი წინააღმდეგობის სიდიდე. ერთკონტურიანი პარამეტრული გამაძლიერებლის მუშაობის დროს შეტანილი უარყოფითი წინააღმდეგობა

$$R = \frac{m}{2} \cdot \frac{1}{\omega C_0},$$

ამიტომ, კონტურში რხევის გენერაციისა და გაძლიერების პირობა შეადგენს უტოლობას

$$\frac{m}{2} \cdot \frac{1}{\omega C_0} \geq r. \quad (12.5)$$

სადაც r არის დიოდის მოცულობითი წინააღმდეგობა.

თანახმად (10.5) ფორმულისა, სიხშირე, რომელზედაც დიოდს შეუძლია გაძლიერება, მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$\nu_{max} = \frac{m}{4\pi C_0 r}. \quad (12.6)$$

ჩვეულებრივ $m \sim 0,6$, ამიტომ კრიტიკულ სიხშირეს განსაზღვრავენ შემდეგი ფორმულით

$$\nu_{kp} = \frac{1}{2\pi C_0 r}. \quad (12.7)$$

როგორც ვხედავთ $\nu_{kp} \sim 5$ -ჯერ აღემატება გაძლიერების მაქსიმალურ სიხშირეს, რომელიც რეალურად შეიძლება მიღწეულ იქნეს. ხშირად შემოაქვთ ხმაურის კოეფიციენტის ცნება შემდეგი სახის:

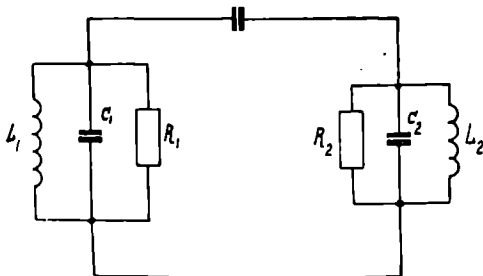
$$F = \frac{1}{1 - \nu/\nu_{max}}. \quad (12.8)$$

თანახმად ამ ფორმულისა, მაქსიმალურ სიხშირეზე მიახლოებისას ხმაურის კოეფიციენტი იზრდება, ამიტომ სასურველი არ არის დიოდის მუშაობა ν_{max} -ს მახლობლად.

ნახ. 124-ზე ნაჩვენებია ორკონტურიანი პარამეტრული გამაძლიერებლის სქემა, აქ პარამეტრული დიოდი წარმოადგენს ორ რეზონანსულ სისტემებს შორის ტევალური კავშირის ელემენტს. ერთი მათგანი აწყობილია

გასაძლიერებელი სიგნალის სიხშირეზე, ხოლო მეორე — სიხშირეთა სხვაობაზე $\nu_H - \nu_C$, სადაც ν_H არის დამტენი ძაბვის სიხშირე, ორკონტურიან პარამეტრულ გამაძლიერებელში საჭირო ფაზური თანათარღობა ხორციელდება ავტომატურად.

დასასრულს საჭიროა აღინიშნოს შემდეგი: თანახმად (12.2) ფორმულისა, ჩამკეტი ძაბვის V_0 -ის მნიშვნელობის ცვლილებით შეიძლება შევცვა-



ნახ. 124

ლოთ საწყისი ტევადობა C_0 , ეს გარემოება შეიძლება გამოყენებული იქნეს რეზონანსული კონტურის ელექტრონული გადაკეთებისათვის. ასეთ დიოდებს ხშირად ვარიკაპებს უწოდებენ. ტევადობის ცვლილებას ძაბვის მიხედვით იყენებენ აგრეთვე პარამონიკების გენერაციისათვის და სხვ.

§ 5. $p-n-p$ ტრანზისტორი

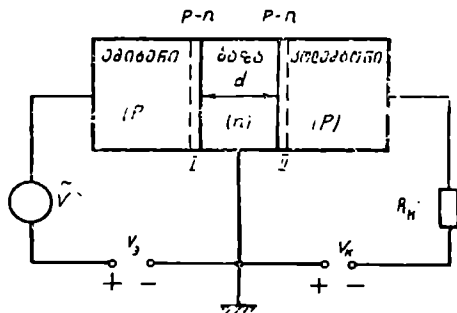
1948 წელს ბარდინისა და ბრეტენის მიერ აღმოჩენილ იქნა წერტილოვანი ტრანზისტორი, რომელმაც მნიშვნელოვანი გარდატეხა გამოიწვია ელექტრონული ტექნიკის განვითარებაში. რის გამოც აღნიშნულმა ავტორებმა ნობელის პრემია დაიმსახურეს.

წერტილოვანი ტრანზისტორის მახასიათებლების არასტაბილურობისა და დიდ ფარგლებში გაბნევის გამო, მათი დაპროექტება მეტად ძნელი აღმოჩნდა. ამიტომ წერტილოვანი ტრანზისტორები ამჟამად თითქმის ხმარებაში არ არის. მაგრამ მიუხედავად ამისა, მისი მუშაობის პრინციპს გაკვირვებით შევხებით შემდეგ პარაგრაფში. უპირველეს ყოვლისა, განვიხილავთ ბიპოლარულ ტრანზისტორს, რომლის მუშაობის პრინციპი დამყარებულია ძირითადი და არაძირითადი მატარებლების (დადებითი და უარყოფითი მუხტების) მოძრაობაზე. ასეთი ტრანზისტორი მზადდება $n-G_p$ -ს მასალისაგან, რომლის ორივე მხარეზე დიფუზიის გზით შეჰყავთ ინდიუმის მინარეგები, რომლებიც აქცეპტორის როლს

ასრულებენ. ამიტომ ნიმუშის ორივე ბოლოზე მიიღება p - G_e , რომელთა შორის მოთავსებულია n - G_e -ს ფენა (ნახ. 125). ასეთ ტრანზისტორს p - n - p ტრანზისტორი ეწოდება.

იგი შედგება ორი p და ერთი n უბნებისაგან: n და p უბნების შეხების ადგილებზე მიიღება I და II გადასვლის ფენები.

პირველ p - n გადასვლის ფენაზე მოდებულია დადებითი (p -ზე დადებითი, n -ზე უარყოფითი), ხოლო მეორეზე — უარყოფითი ძაბვა (p -ზე უარყოფითი, n -ზე დადებითი).



ნახ. 125

უბანს, რომელზედაც მოდებულია დადებითი ძაბვა, ეწოდება ემიტერი, ხოლო მეორეს, რომელზედაც მოდებულია უარყოფითი ძაბვა — კოლექტორი. კოლექტორსა და ემიტერს შორის მოთავსებულ ფენას ეწოდება ბაზა. ამრიგად, ნახ. 125-ზე მოცემულ სქემაში ემიტერ-ბაზა ჩართულია გამშვები, ხოლო კოლექტორ-ბაზა — ჩამკეტი მიმართულებით.

რადგანაც ემიტერზე მოდებულია V_b ძაბვა გამშვები მიმართულებით, ამიტომ მოხდება ხვრელების ინექცია ემიტერიდან ბაზაში და ელექტრონების ინექცია ბაზიდან ემიტერში. ჩვენ შეგვიძლია დიდი მიახლოებით მივიღოთ, რომ n და p არეებში ელექტრული ველი არა გვაქვს. ველი ძირითადად არის თვით გადასვლის ფენებში, ამიტომ ბაზურ არეში ხვრელების კონცენტრაციის გრადიენტის არსებობის გამო მათი მოძრაობა ხდება დიფუზიის გზით. თუ ბაზის სიგანე d მეტია, ვიდრე ხვრელების დიფუზური განარბენის სიგრძე L_p , მაშინ ხვრელების დიდი ნაწილი რეკომბინირდება ელექტრონებთან და ვერ მიაღწევს კოლექტორის გადასასვლელთან. მაგრამ, თუ $d < L_p$, მაშინ პირიქით, ხვრელების დიდი ნაწილი რეკომბინაციის გარეშე მიაღწევს კოლექტორის p - n გადასვლის ფენამდე და ვინაიდან ამ უკანასკნელზე მოდებულია ძაბვა V_k არაგამშვები მიმართულებით, მოხდება ხვრელების ინექცია ბაზიდან კოლექტორში,

რომელსაც შეესაბამება კოლექტორის წრედში ხერელური დენი J_{kp} . ბაზურ არეში ხერელების რეკომბინაცია ელექტრონებთან გამოიწვევს ასეთივე რაოდენობის ელექტრონების შემოსვლას ბაზის გამოყვანი ელექტრონების საშუალებით, რათა აღდგეს ელექტრონიტრალობის პირობა ბაზურ არეში.

მაშასადამე, ემიტერ-ბაზაში გამავალი სრული დენი შედგება ხერელური და ელექტრონული დენების ჯამისაგან:

$$J_s = J_{sp} + J_{sn} \quad (12.9)$$

პირველი (J_{sp}) ეთანადება ემიტერიდან ბაზაში ინექტირებულ ხერელებს, ხოლო მეორე (J_{sn})-ბაზიდან ემიტერში ინექტირებულ ელექტრონებს. მაგრამ, თანახმად ნახ. 125-სა, ელექტრონული დენი სასარგებლო არ არის, რადგანაც იგი იკვრება ემიტერის წრედში და ამიტომ გაძლიერებასთან დაკავშირებული არ არის. გაძლიერებასთან დაკავშირებულია მხოლოდ ხერელური დენი, რადგანაც იგი კოლექტორის წრედში გადის.

ფარდობას ემიტერის ხერელური დენისა სრულ დენთან $V_k = \text{const}$ დროს ეწოდება ემიტერის ეფექტურობა

$$\gamma = \frac{J_{sp}}{J_s} \Big|_{V_k = \text{const}} = 1 - \frac{J_{sn}}{J_s} \Big|_{V_k = \text{const}} \quad (12.10)$$

ცხადია, ემიტერის ეფექტურობის გასაძლიერებლად საჭიროა ელექტრონული დენი მინიმუმამდე იქნეს დაყვანილი.

ფარდობას კოლექტორის ხერელური დენისა ემიტერის ხერელურ დენთან $V_k = \text{const}$ დროს, ეწოდება გადატანის კოეფიციენტი

$$\beta = \frac{J_{kp}}{J_{sp}} \Big|_{V_k = \text{const}} \quad (12.11)$$

კოლექტორ-ბაზაში გამავალი დენიც შედგება ხერელური და ელექტრონული დენების ჯამისაგან

$$J_k = J_{kp} + J_{kn} \quad (12.12)$$

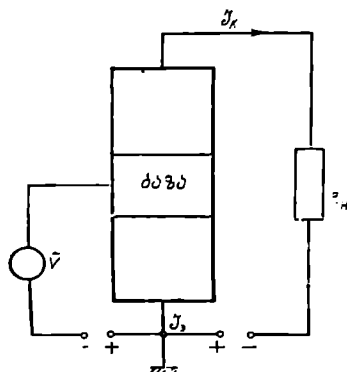
ფარდობას კოლექტორში გამავალი სრული დენისა ემიტერში გამავალ სრულ დენთან $V_k = \text{const}$ დროს, ეწოდება ტრანზისტორის (ტრიოდის) გაძლიერების კოეფიციენტი დენის მიხედვით

$$\alpha = \frac{J_k}{J_s} \Big|_{V_k = \text{const}} \quad (12.13)$$

თუ ემიტერის წრედში გარდა მუდმივი V_s ძაბვისა ჩართულია აგრეთვე ცვალებადი ძაბვა $\tilde{V}_s$ (ნახ. 125), მაშინ ემიტერიდან ბაზაში ინექტირებულ ხერელების რაოდენობა და, მაშასადამე, კოლექტორში ხერელური დენის სიდიდე ცვალებადი იქნება. ამიტომ თუ კოლექტორის

წრელში ჩართული გვექნება მაღალი წინააღმდეგობის დატვირთვა, მაშინ მის ბოლოებზე შეიძლება მივიღოთ ძაბვის ანდა სიმძლავრის გაძლიერება. ნახ. 125-ზე მოცემულ სქემაში დამიწებულია ბაზა (ბაზა საერთოა). მისი მუშაობა ანალოგიურია ვაკუუმური ტრიოდისა დამიწებული ბაზით (საერთო ბაძე). ამიტომ ასეთი სქემა არ იძლევა გაძლიერებას დენის მიხედვით, რადგანაც ამ დროს ემიტერის სრული დენი გადის სიგნალის წყაროში. ნახ. 126-ზე ნაჩვენებ სქემაში დამიწებულია (საერთოა) ემიტერი, მისი მუშაობა ანალოგიურია ვაკუუმური ტრიოდისა დამიწებული კათოდით. ასეთი სქემა იძლევა გაძლიერებას როგორც დენის, ისე ძაბვის მიხედვით, რადგანაც სიგნალის წყაროში გადის მხოლოდ ბაზური დენი, რომელიც ბევრად ნაკლებია კოლექტორის დენზე.

ამ შემთხვევაში გაძლიერების კოეფიციენტი დენის მიხედვით იქნება



ნახ. 126

$$k = \frac{J_k}{J_\delta} \quad (12.14)$$

ახლა გადავიდეთ ემიტერსა და კოლექტორში გამავალი დენის გამოთვლაზე.

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ბაზურ არეში ემიტერიდან ინექტირებული ხვრელების მოძრაობა ხდება ძირითადად დიფუზიის გზით, ამიტომ მათი განაწილება ბაზურ არეში მოიცემა დიფუზიური განტოლებით:

$$\frac{d^2 p}{dx^2} = \frac{\Delta p}{l_p^2} \quad (12.15)$$

სადაც $\Delta p = p(x) - p_n$ არის ჭარბი კონცენტრაცია ხვრელებისა ბაზურ არეში. (12,15) განტოლების ამოხსნას შეადგენს შემდეგი ფუნქცია

$$\Delta p(x) = A e^{-\frac{x}{l_p}} + B e^{\frac{x}{l_p}} \quad (12.16)$$

$p - n$ გადასვლის თეორიის განხილვის დროს ნაჩვენები იყო, რომ $p - n$ გადასვლის საზღვარზე არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია იცვლება შემდეგი კანონით

$$p = p_n e^{\frac{eV}{kT}}.$$

ვინაიდან ემიტერზე მოღებულია დადებითი V_9 ძაბვა, ამიტომ ემიტერის საზღვარზე ბაზის მხარეს ხვრელების კონცენტრაცია იზრდება

$$p(0) = p_n e^{\frac{eV_9}{kT}}.$$

კოლექტორის საზღვარზე კი ხვრელების კონცენტრაცია მცირდება

$$p(d) = p_n e^{-\frac{eV_h}{kT}}.$$

თუ მხედველობაში მივიღებთ ზემოთ მოყვანილ ფორმულებს, მაშინ A და B კოეფიციენტები შეიძლება მონახული იქნეს შემდეგი სასაზღვრო პირობიდან.

$$\begin{aligned} \text{როდესაც } x=0, \quad \Delta p(0) &= p_n \left(e^{\frac{eV_9}{kT}} - 1 \right), \\ x=d \quad \Delta p(d) &= p_n \left(e^{-\frac{eV_h}{kT}} - 1 \right). \end{aligned} \quad (12.17)$$

ამ პირობების დაკმაყოფილება იძლევა

$$\begin{aligned} A &= \frac{p_n}{2 \operatorname{sh} \frac{d}{l_p}} \left\{ e^{\frac{d}{l_p}} \left(e^{\frac{eV_9}{kT}} - 1 \right) + \left(1 - e^{\frac{eV_h}{kT}} \right) \right\}, \\ B &= \frac{p_n}{2 \operatorname{sh} \frac{d}{l_p}} \left\{ \left(e^{-\frac{eV_h}{kT}} - 1 \right) + e^{-\frac{d}{l_p}} \left(e^{\frac{eV_9}{kT}} - 1 \right) \right\}. \end{aligned}$$

A და B კოეფიციენტების ამ მნიშვნელობების შეტანა (12.16) ფორმულაში, გვაძლევს:

$$\begin{aligned} \Delta p(x) &= \frac{p_n}{2 \operatorname{sh} \frac{d}{l_p}} \left\{ \left(e^{\frac{eV_9}{kT}} - 1 \right) \operatorname{sh} \frac{d-x}{l_p} + \right. \\ &\quad \left. + \left(e^{-\frac{eV_h}{kT}} - 1 \right) \operatorname{sh} \frac{x}{l_p} \right\}. \end{aligned} \quad (12.18)$$

ხერელური დენი ემიტერისა

$$J_{\text{ap}} = -eD_p \frac{dp}{dx} \Big|_{x=0} = \\ = \frac{eD_p p_n}{l_p} \left\{ \left(e^{\frac{eV_{\text{a}}}{kT}} - 1 \right) \operatorname{cth} \frac{d}{l_p} + \left(1 - e^{\frac{eV_{\text{h}}}{kT}} \right) c \operatorname{sch} \frac{d}{l_p} \right\}. \quad (12.19)$$

ხერელური დენი კოლექტორისა

$$J_{\text{hp}} = -eD_p \frac{dp}{dx} \Big|_{x=d} = \\ = \frac{eD_p p_n}{l_p} \left\{ \left(e^{\frac{eV_{\text{h}}}{kT}} - 1 \right) \operatorname{cth} \frac{d}{l_p} + \left(1 - e^{-\frac{eV_{\text{h}}}{kT}} \right) c \operatorname{sch} \frac{d}{l_p} \right\}. \quad (12.20)$$

რეკომბინაციური დენი

$$J_r = J_{\text{ap}} - J_{\text{hp}} = \\ = \frac{eD_p p_n}{l_p} \left(e^{\frac{eV_{\text{a}}}{kT}} + e^{-\frac{eV_{\text{h}}}{kT}} - 2 \right) \left(\operatorname{cth} \frac{d}{l_p} - c \operatorname{sch} \frac{d}{l_p} \right). \quad (12.21)$$

ვინაიდან ტრანზისტორის მუშაობის რეჟიმის დროს $eV_{\text{h}} \gg kT$, ამიტომ მიღებულ ფორმულებში $e^{-\frac{eV_{\text{h}}}{kT}}$ შეიძლება ამოვადოთ, გარდა ამისა, ბაზურ არეში რეკომბინაციის გასაძლიერებლად აუცილებელია $d \ll L_p$. ეს გარემოება საშუალებას გვაძლევს ჰიპერბოლური ფუნქციები დავშალოთ მწკრივად $\frac{d}{l_p}$ -ს ხარისხებად. ეს გვაძლევს:

$$J_{\text{ap}} = \frac{eD_p p_n}{d} \left\{ e^{\frac{eV_{\text{a}}}{kT}} \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2 \right\}, \quad (12.22)$$

$$J_{\text{hp}} = \frac{eD_p p_n}{d} \left\{ e^{\frac{eV_{\text{h}}}{kT}} \left(1 - \frac{1}{6} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2 \right\}, \quad (12.23)$$

$$J_r = \frac{eD_p p_n}{2l_p} \cdot \frac{d}{l_p} \left(e^{\frac{eV_{\text{a}}}{kT}} - 2 \right) = \frac{e p_n d}{2\tau_p} \left(e^{\frac{eV_{\text{a}}}{kT}} - 2 \right). \quad (12.24)$$

ჩვეულებრივი ტრანზისტორის მუშაობის რეჟიმის დროს $eV_{\text{a}} \gg kT$. ამიტომ ის წევრები, რომლებიც არ შეიცავენ მამრავლს $e^{eV_{\text{a}}/kT}$ -ს, შეიძლება ამოვიღოთ, ეს გვაძლევს:

$$J_{\text{зп}} \simeq \frac{eD_p p_n}{d} \left(1 + \frac{1}{3} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2 \right) e^{\frac{eV_3}{kT}} \simeq \frac{eD_p p_n}{d} e^{\frac{eV_3}{kT}}, \quad (12.22a)$$

$$J_{\text{кп}} \simeq \frac{eD_p p_n}{d} \left(1 - \frac{1}{6} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2 \right) e^{\frac{eV_3}{kT}} \simeq \frac{eD_p p_n}{d} e^{\frac{eV_3}{kT}}, \quad (12.23a)$$

$$J_r = J_{\text{зп}} - J_{\text{кп}} \simeq \frac{e p_n d}{2 \tau_p} \cdot e^{\frac{eV_3}{kT}}. \quad (12.24a)$$

სრულიად ანალოგიური ფორმულები მიიღება ელექტრული დენისათვის, მაგალითად, ემიტერის $p-n$ გადასვლაზე ელექტრონული დენი

$$J_{\text{зн}} \simeq \frac{eD_n n_p}{l_n} e^{\frac{eV_3}{kT}}. \quad (12.25)$$

კოლექტორის $p-n$ გადასვლაზე

$$J_{\text{кн}} \simeq \frac{eD_n n_p}{l_n} \cdot e^{-\frac{eV_k}{kT}}. \quad (12.26)$$

როგორც ვხედავთ, $J_{\text{зн}} \gg J_{\text{кн}}$, ამიტომ ხშირად $J_{\text{кн}}$ -ს მხედველობაში არ ღებულობენ. ამიტომ კოლექტორში გამავალი სრული დენი $J_k = J_{\text{кп}} + J_{\text{кн}} \simeq J_{\text{кп}}$. მიღებული ფორმულები საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ ემიტერის ეფექტურობა γ და გადატანის კოეფიციენტი β .

$$\beta = \frac{J_{\text{кп}}}{J_{\text{зп}}} = \frac{1 - \frac{1}{6} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2}{1 + \frac{1}{3} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2} \simeq 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{d}{l_p} \right)^2.$$

ამრიგად

$$J_{\text{кп}} = \beta J_{\text{зп}} \simeq \beta \gamma J_3 \quad (12.27)$$

და

$$J_r = J_{\text{зп}} - J_{\text{кп}} = (1 - \beta) J_{\text{зп}} = (1 - \beta) \gamma J_3. \quad (12.28)$$

ემიტერის ეფექტურობა

$$\gamma = \frac{J_{\text{зп}}}{J_3} = \frac{1}{1 + \frac{J_{\text{зн}}}{J_{\text{зп}}}} = \frac{1}{1 + \frac{D_n n_p d}{D_p p_n L_n}}.$$

მეორე მხრივ

$$\frac{n_p}{p_n} = \frac{n_n}{p_p}$$

და

$$\sigma_0 = e n_n \mu_n, \quad \sigma_3 = e p_p \mu_p,$$

სადაც σ_9 და σ_8 არის ემიტერისა და ბაზის გამტარებლობა, შესაბამისად. თუ მხედველობაში მივიღებთ ამ თანაფარდობებს, მაშინ ემიტერის ეფექტურობისათვის საბოლოოდ შემდეგ გამოსახულებას მივიღებთ:

$$\gamma = \frac{1}{1 + \frac{\sigma_8}{\sigma_9} \cdot \frac{d}{l_n}} \simeq 1 - \frac{\sigma_8}{\sigma_9} \cdot \frac{d}{l_n}, \quad (12.29)$$

ელექტრონული დენი ემიტერისა

$$J_{n3} = J_3 - J_{3p} = (1 - \gamma) J_3. \quad (12.30)$$

სრული ბაზური დენი შედგება სამი ნაწილისაგან

$$J_8 = J_{3n} + J_{kn} + J_r.$$

რადგანაც J_{kn} მცირეა, ამიტომ თანახმად (12.25) და (12.28) ფორმულებისა, გვექნება

$$J_8 = (1 - \gamma) J_3 + \gamma (1 - \beta) J_3 = (1 - \beta\gamma) J_3. \quad (12.31)$$

რადგანაც J_{kn} მცირეა, ამიტომ კოლექტორის სრული დენი უდრის კოლექტორის ხერელურ დენს

$$J_n \simeq J_{kp} = \beta J_{3p} = \beta\gamma J_3. \quad (12.32)$$

რეკომბინაციული დენი

$$J_r = (1 - \beta) J_{3p} = (1 - \beta) \gamma J_3. \quad (12.33)$$

ემიტერის სრული დენისათვის შეიძლება მიახლოებით დაიწეროს

$$J_3 = \frac{1}{\gamma} J_{3p} \simeq \frac{e D_p p_n}{\gamma d} \cdot e \frac{e V_3}{k T}. \quad (12.34)$$

ამრიგად ყველა დენი (როგორც ხერელური ისე ელექტრონული) გამოისახება (მიახლოებით) ემიტერის დენისა და β , γ კოეფიციენტების საშუალებით.

დასასრულს საჭიროა აღინიშნოს, რომ ყოველი ტრანზისტორი მუშაობს გარკვეული ტემპერატურის ქვევით. ტემპერატურის ის კრიტიკული მნიშვნელობა, რომლის ზევით ტრანზისტორის მუშაობა ფუჭდება, დამოკიდებულია თვით ნიმუშის (მასალის) თვისებაზე და ბაზური არის ლეგირების ხარისხზე. ცხადია, როდესაც ბაზური არის ლეგირების ხარისხი ისეთია, რომ ძირითადი მატარებლის კონცენტრაცია მიუახლოვდება არა-ძირითადი მატარებლების კონცენტრაციას, ტრანზისტორის მუშაობა ფუჭდება. ძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია კი დამოკიდებულია მასალის ლეგირების ხარისხზე და მასალის აკრძალული ზონის სიგანეზე. N_A -ს უფრო მეტი აკრძალული ზონა აქვს, ვიდრე G_e -ს, ამიტომ N_A -ს მასალი-

საგან დამზადებული ტრანზისტორის კრიტიკული ტემპერატურა უფრო მაღალი იქნება, ვიდრე G_e -ს მასალისაგან დამზადებული ტრანზისტორისა. ასე მაგალითად, $n-G_e$ -ს მასალისაგან დამზადებული ტრანზისტორის კრიტიკული ტემპერატურა აღწევს 100°C -მდე, მაშინ როდესაც S_i -საგან დამზადებული ტრანზისტორის კრიტიკული ტემპერატურა 200°C -მდე აღწევს. მიუხედავად ამ უპირატესობისა, S_i -ს მასალისაგან ტრანზისტორის დამზადების ტექნოლოგია უფრო ნაკლებად არის დამუშავებული, ამიტომ G_e -ს მასალისაგან დამზადებული ტრანზისტორები უფრო მეტად არის გამოყენებული ტექნიკაში,

§ 6. ტრანზისტორის ძირითადი პარამეტრები

1. გაძლიერების კოეფიციენტი. თანახმად (12.27) დამოკიდებულებისა, გაძლიერების კოეფიციენტისათვის ვღებულობთ შემდეგ გამოსახულებას

$$\alpha = \frac{J_h}{J_g} \simeq \frac{J_{hp}}{J_g} = \beta \gamma < 1.$$

როდესაც სქემაში დამიწებულია ემიტერი, მაშინ გაძლიერების კოეფიციენტი ღენის მიხედვით იქნება

$$k = \frac{J_h}{J_b}.$$

თანახმად (12.32) და (12.31) ფორმულებისა,

$$k = \frac{\beta \gamma}{1 - \beta \gamma} = \frac{1}{1 - \alpha}. \quad (12.35)$$

რადგანაც $\alpha \simeq 1$ გაძლიერების კოეფიციენტი ღენის მიხედვით ასეთ სქემაში ძალიან დიდია

$$k \gg 1.$$

2. ვოლტ-ამპერული მახასიათებლის დახრილობა. დახრილობა S წარმოადგენს ფარდობას კოლექტორში ღენის ცვლილებისა ემიტერზე მოდებული ძაბვის ცვლილებაზე $V_k = \text{const}$ დროს, ე. ი.

$$S = \left. \frac{dJ_k}{dV_g} \right|_{V_k = \text{const}}.$$

თანახმად (10.32) ფორმულისა, ვღებულობთ

$$S = \beta \gamma \frac{dJ_g}{dV_g} = \beta \gamma \frac{e}{kT} J_g = \frac{e}{kT} J_k. \quad (12.36)$$

ამრიგად დახრილობა S იზრდება ემიტერის ღენის პროპორციულად.

3. კოლექტორის შინაგანი წინააღმდეგობა.

$$R_i = \left(\frac{\partial J_k}{\partial V_k} \right)_{V_0 = \text{const}}^{-1}. \quad (12.37)$$

რადგანაც $J_k = \beta \gamma J_0$, ამიტომ ერთი შეხედვით კოლექტორის დენი არ უნდა იყოს დამოკიდებული კოლექტორის ძაბვაზე, მაგრამ ეს ასე არ არის, რადგანაც კოლექტორ-ბაზაზე მოდებული ძაბვის V_k -ს გადიდებით ბაზის სიგანე მცირდება

$$d = d_0 - L_k(V_k),$$

სადაც

$$L_k = \left(\frac{\chi(\varphi_0 + eV_k)}{2\pi e^2 n_n} \right)^{1/2}. \quad (11.38)$$

d -ს შემცირებით კოლექტორის დენი გაიზრდება, რადგანაც ამ დროს გაიზრდება ემიტერის დენი და ამავე დროს შემცირდება დანაკარგი რეკომბინაციაზე. ამრიგად,

$$\begin{aligned} \left. \frac{dJ_k}{dV_k} \right|_{V_0 = \text{const}} &= \left(\frac{\partial J_k}{\partial d} \right)_{V_0} \cdot \left(\frac{\partial d}{\partial V_k} \right)_{V_0 = \text{const}} = \\ &= \frac{e D_p p_n}{d^2} e \frac{e V_0}{kT} \cdot \frac{\partial L_k}{\partial V_k} = \frac{J_k}{d} \frac{\partial L_k}{\partial V_k}. \end{aligned}$$

მაგრამ, თანახმად (12.38) ფორმულისა

$$\frac{\partial L_k}{\partial V_k} \simeq \frac{1}{2} \frac{L_k}{V_k},$$

ამიტომ

$$\frac{\partial J_k}{\partial V_k} \simeq \frac{1}{2} \cdot \frac{L_k}{d} \cdot \frac{J_k}{V_k}.$$

ამ მნიშვნელობების ჩასმა (12.37) ფორმულაში გვაძლევს

$$R_i \simeq \frac{2V_k d}{L_k J_k} = \frac{2dV_k}{L_k J_0}. \quad (12.39)$$

ამრიგად, კოლექტორის წინააღმდეგობა R_i იზრდება d -ს გადიდებით და L_k -ს შემცირებით. მაგრამ d -ს ძალიან გადიდებაც არ შეიძლება, რადგანაც ამ დროს გაიზრდება რეკომბინაციული დანაკარგიც. L_k -ს შემცირებაც შეზღუდულია, რადგანაც L_k -ს შემცირება ნიშნავს n_n -ის გადიდებას (12.38), ეს უკანასკნელი კი მოგვცემს დენის ელექტრონული ნაწილის გადიდებას, რაც არასასურველია.

4. გაძლიერება ძაბვის მიხედვით μ . გაძლიერება ძაბვის მიხედვით არის ფარდობა კოლექტორის ძაბვის ცვლილებისა ემიტერის ძაბვის ცვლილებასთან $J_k = \text{const}$ დროს, ე. ი.

$$\mu = - \left(\frac{\partial V_k}{\partial V_s} \right)_{J_k = \text{const}}$$

რადგანაც

$$J_k = J_k(V_k, V_s),$$

ამიტომ

$$dJ_k = \left(\frac{\partial J_k}{\partial V_s} \right)_{V_k} \cdot dV_s + \left(\frac{\partial J_k}{\partial V_k} \right)_{V_s} dV_k = 0.$$

აქედან

$$S dV_s + \frac{1}{R_k} dV_k = 0$$

ანდა

$$\mu = - \left(\frac{\partial V_k}{\partial V_s} \right)_{J_k} = S R_k.$$

S და R_k ზემოთ მიღებული მნიშვნელობების ჩასმა გვაძლევს:

$$\mu = \frac{J_k}{kT} \cdot \frac{2V_k d}{L_k J_s} = \frac{2d}{L_k} \cdot \frac{eV_k}{kT}. \quad (12.40)$$

მაგრამ, თანახმად (12.38) ფორმულისა $\frac{V_k}{L_k} \sim \sqrt{V_k}$, ამიტომ გაძლიერების კოეფიციენტი ძაბვის გადიდებით იზრდება $\sqrt{V_k}$ -ს პროპორციულად.

5. გაძლიერების კოეფიციენტი სიმძლავრის მიხედვით η . სიმძლავრის მიხედვით გაძლიერება წარმოადგენს ფარდობას კოლექტორის წრედში ცვალებადი სიგნალის მაქსიმალური მნიშვნელობისა ემიტერის წრედის სიმძლავრესთან ($R_n \simeq R_k$ ოპტიმალური დატვირთვის დროს)

$$\eta = \frac{1}{4} \mu k = \frac{1}{4} S R_k k. \quad (12.41)$$

თანახმად (12.39) და (12.40) ფორმულებისა, ვღებულობთ

$$\eta = \frac{\alpha d}{2L_k (1 - \alpha)} \cdot \frac{eV_k}{kT}. \quad (12.42)$$

6. შესავალი გამტარებლობა G_δ . შესავალი გამტარებლობა უდრის შეფარდებას ბაზური დენის ცვლილებისა შესავალი ძაბვის ცვლილებასთან, ე. ი.

$$G_\delta = \left(\frac{\partial J_\delta}{\partial V_s} \right)_{V_k} = \frac{1 - \alpha}{\alpha} \left(\frac{\partial J_k}{\partial V_s} \right)_{V_k} = \frac{1 - \alpha}{\alpha} \cdot S = \frac{S}{k}. \quad (12.43) -$$

ამრიგად, შესავალი გამტარებლობა მით ნაკლებია, რაც მეტია გაძლიერების კოეფიციენტი ღენის მიხედვით k და რაც მცირეა დახრილობა δ .

7. კრიტიკული სიხშირე $\nu_{kp} = p - n$ გადასვლის თეორიის განხილვის დროს ჩვენ აღენიშნეთ, რომ $p - n$ გადასვლის საზღვარზე არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია იზრდება, როდესაც მასზე მოდებულია გამწვები მიმართულების ძაბვა, შემდეგ ისინი დიფუზიის გზით ვრცელდებიან შიგნით და $l(l_n$ ან $l_p)$ მანძილზე გავლისას რეკომბინირდებიან ძირითად მატარებელთან. მათი სიცოცხლის ხანგრძლივობა $\tau = \frac{l^2}{D}$,

ამიტომ თუ გარეგანი ძაბვის სიხშირე მეტია, ვიდრე $\frac{1}{\tau}$, მაშინ ღენის მატარებელთა ჭარბი კონცენტრაცია სანამ დიფუნდირდებოდეს მოცულობის შიგნით, ძაბვის მიმართულება შეიცვლება და საზღვარზე გაზრდილ კონცენტრაციას არაძირითადი მატარებლებისა უკანვე გადმოყრის. ამრიგად დიდი დაკარგავს გამართვის თვისებას. დიოდის მუშაობისათვის საჭიროა გარეგანი ძაბვის სიხშირე ნაკლები იყოს $\frac{1}{\tau}$ -ზე. სრულიად ანა-

ლოგიური მდგომარეობაა ტრანზისტორშიც. ემიტერიდან ბაზაში ინექტირებულ ხერელების ბაზური არის d -ს გარბენას დიფუზიის გზით დასჭირდება $t = \frac{d^2}{D_p}$ დრო. ამიტომ თუ სიგნალის სიხშირე $\nu \ll \frac{D_p}{2d^2}$, მაშინ

ბაზაში ინექტირებული ხერელების უმეტესი ნაწილი მიაღწევს კოლექტორის გადასვლამდე და ყველა ზემოთ გახსნილი ფორმულები ძალაში რჩებიან. პირობით მიღებულია, კრიტიკული სიხშირე ვუწოდოთ ისეთ სიხშირეს, რომლის დროსაც გაძლიერების კოეფიციენტი ღენის მიხედვით ეცემა 70%-მდე ანდა $k = 2 \div 3$, ამრიგად

$$\nu_{kp} \simeq \frac{D_p}{2,5 \cdot d^2}. \quad (11.44)$$

8. დიფუზური ტევადობა. მაღალ სიხშირეზე ბაზური არე თავისებური ტევადობის როლს ასრულებს. პერიოდის პირველ ნახევარში ადგილი აქვს ბაზაში მუხტების დაგროვებას, მეორე ნახევარში — მუხტების უკან დაბრუნებას ემიტერზე. ცხადია, ამ დროს მოცულობითი მუხტების დაგროვებას ადგილი არა აქვს, რადგანაც, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ყოველ მომენტში ბაზურ არეში ხერელების მუხტები კომპენსირებული ხდება ბაზური ელექტროდიდან შემოსული ელექტრონებით. ასეთ ტევადობას უწოდებენ დიფუზურს. ბაზურ არეში ჭარბი ხერელების საერთო რიცხვი

$$P = \int_0^a (p(x) - p_n) dx =$$

$$= \int_0^d \left[p_n \left(1 - \frac{x}{d} \right) e^{\frac{eV_s}{kT}} - p_n \right] dx = \frac{p_n d}{2} e^{\frac{eV_s}{kT}}.$$

თანახმად (12.24a) და (12.28) ფორმულებისა, ვლებულობთ

$$P \simeq \frac{p_n d}{2} e^{\frac{eV_s}{kT}} = \frac{J_r \tau_p}{e} = \frac{(1 - \beta)}{e} \gamma \tau_p J_s.$$

დიფუზური ტევადობა განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით

$$C_D = e \frac{dP}{dV_s} = (1 - \beta) \gamma \tau_p \frac{dJ_s}{dV_s} = (1 - \beta) \tau_p \cdot S \cdot \gamma,$$

ნდა (12.27) და (12.36) ფორმულების საფუძველზე, ვლებულობთ

$$C_D = \frac{S d^2}{2 D_p} = \frac{e J_h d^2}{2 k T D_p}. \quad (12.45)$$

8. კოლექტორის ტევადობა. მაღალი სიხშირის ცვლებადი სიგნალის შემთხვევაში კოლექტორის $p-n$ გადასვლაზე შეიძლება გადიოდეს არა მარტო ომური, არამედ აგრეთვე ტევადური დენი. გარკვეული მიახლოებით $p-n$ გადასვლა შეიძლება განხილული იქნეს როგორც ბრტყელი კონდენსატორი, ამიტომ კოლექტორის ტევადობა შეიძლება განისაზღვროს ბრტყელი კონდენსატორის ტევადობის ფორმულით

$$C_k = \frac{\kappa \cdot S}{4\pi L_k}.$$

ანალოგიური ფორმულით გამოისახება ემიტერის $p-n$ გადასვლის ტევადობა C_s , მაგრამ ეს უკანასკნელი ბევრად ნაკლებია ემიტერის დიფუზურ ტევადობასთან შედარებით, ამიტომ ემიტერის ტევადობას მხედველობაში არ ღებულობენ.

§ 7. სხვა ტიპის ტრანზისტორები

როგორც წინა პარაგრაფში დავინახეთ, კრიტიკული სიხშირე შეიძლება გაეზარდოს დიფუზიის კოეფიციენტის გადიდებით ანდა ბაზის სიგანის d -ს შემცირებით. მეორე მხრივ, ცნობილია, რომ G_e -ში ელექტრონების დიფუზიის კოეფიციენტი ორჯერ მეტია ხერხების დიფუზიის კოეფიციენტზე, ამიტომ კრიტიკული სიხშირის გაზრდის მიზნით უმჯობესია ვისმართოთ $n-p-n$ ტრანზისტორი, ასეთ ტრანზისტორში ემიტერი და კო-

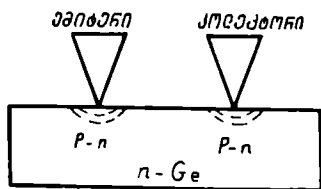
ლექტორი წარმოადგენენ $n-G_e$ -ს, ხოლო ბაზას — $p-G_e$. ამ შემთხვევაში ემიტერიდან ბაზაში ინჟექტირება ხდება ელექტრონებისა, რომლებიც ბაზურ არეში არაძირითადი მატარებლებია, ისინი წარმოადგენენ სასარგებლო დენს. ასეთი ტრანზისტორის კრიტიკული სიხშირის გადღეღებისათვის ყველაზე ეფექტურია ბაზის სიგანის d -ს შემცირება $\nu_k \sim \frac{1}{d^2}$. d -ს შემცირებით იზრდება აგრეთვე გაძლიერების კოეფიციენტი

დენის მიხედვით, რადგანაც ამ დროს დანაქარგი რეკომბინაციაზე მცირდება. მეორე მხრივ, d -ს შემცირებით მნიშვნელოვნად იზრდება ბაზის ომური წინააღმდეგობა, რომელიც ჭერჭერობით ჩვენ არც ერთ გათვლებაში მხედველობაში არ მიგვიღია. ამ დროს ბაზური დენი შეიძლება გავიდეს გვერდითი ელექტროდიდან, რის შედეგად შეიძლება წარმოიშვას ბაზის გასწვრივ ძაბვის შესამჩნევი ვარდნა. ეს კი გამოიწვევს $p-n$ გადასვლის სხვადასხვა წერტილებში დენის სხვადასხვა მნიშვნელობების არსებობას, ამიტომ ხელსაწყოს ნორმალური მუშაობის რეჟიმი დაირღვევა. $p-n$ გადასვლის სისქის შემცირების დროს ბაზის წინააღმდეგობის შესამცირებლად საჭირო იქნება დენის მატარებელთა კონცენტრაცია ბაზაში გავზარდოთ. მეორე მხრივ, მაღალი α -ს შესანარჩუნებლად საჭირო იქნება სათანადოდ გავზარდოთ ემიტერის გამტარებლობაც, რომ ელექტრონული დენის წილი შევამციროთ. $p-n$ გადასვლის სისქის შემცირების დროს მნიშვნელოვნად ეცემა გამრღვევი ძაბვის მნიშვნელობა, ამიტომ კოლექტორზე მაღალი ძაბვის გადაცემაც არ შეიძლება, რადგან სათანადოდ შემცირდება გაძლიერება სიმძლავრის მიხედვით. ამრიგად, d -ს შემცირებით შეიძლება გავზარდოთ კრიტიკული სიხშირე, სამაგიეროდ გაძლიერების კოეფიციენტი სიმძლავრის მიხედვით შემცირდება.

$p-n-i-p$ და $n-p-i-n$ ტრანზისტორები. ერთდროულად მაღალი კრიტიკული სიხშირისა და დიდი გაძლიერების კოეფიციენტის მისაღებად ბაზასა და კოლექტორს შორის იღებენ საკუთარი გამტარებლობის i -ფენას. ასეთ ხელსაწყოს ეწოდება $p-n-i-p$ და $n-p-i-n$ ტრანზისტორი. ისე როგორც დიოდებში, i ფენის სისქეს არჩევენ ისე, რომ კოლექტორის შესაბამის ძაბვაზე მოცულობითი მუხტების არე მოიცავდეს მთლიანად i ფენას. რადგანაც i ფენაში დენის მატარებელთა კონცენტრაცია მცირეა, შესაძლებელი ხდება საკმარისად დიდი სიგანის $p-n$ გადასვლის ფენის მიღება, რომელსაც შეუძლია გაუძლოს შედარებით მცირე C_k -ზე მაღალ ძაბვას, მოდებულს არაგამშვები მიმართულებით. ასე ხელსაწყოში ბაზურ არეში კონცენტრაცია აღწევს $\sim 10^{16}$ — 10^{17} -მდე. ბაზის სისქე $d \sim 2 \div 3$ მკმ, რაც საშუალებას იძლევა კრიტიკული სიხშირე გავზარდოთ 100 მკმ-მდე ბაზის დაბალ წინააღმდეგობაზე.

წერტილოვანი ტრანზისტორი. როგორც შესავალში იყო აღნიშნული, პირველად დამზადებულ იქნა წერტილოვანი ტრანზისტორი,

მაგრამ მისი პარამეტრების არასტაბილურობისა და ფართო ინტერვალში ცვლილების გამო, ასეთი ტრანზისტორები ამჟამად თითქმის ხმარებაში არ არის. წერტილოვან ტრანზისტორს აკეთებენ $n-G_e$ -ს მასალეზისაგან, რომელსაც გაკეთებული აქვს ორი წვეტიანი კონტაქტი, რომელთა მახლობლად წარმოიშობიან $p-n$ გადასვლის ფენები (ნახ. 127). ერთი კონტაქტი ემიტერ-ბაზა ჩართულია გამშვები, ხოლო მეორე — კოლექტორ-ბაზა — არაგამშვები მიმართულებით. ემიტერიდან ბაზაში ($n-G_e$ -ში) ხდებ-



ნახ. 127

ბა ხერხელებს ინექტირება, რომლებიც მოძრაობენ ემიტერიდან კოლექტორისაკენ და ახდენენ მისი გამტარებლობის მოდულირებას. წინათ განხილული ტრანზისტორებისაგან განსხვავებით, აქ ხერხელების მოძრაობა ემიტერიდან კოლექტორისაკენ ხდება არა დიფუზიის გზით, არამედ კოლექტორზე მოდე-

ბული ელექტრული ველით. ელექტროდის მახლობლად ველის დაძაბულობა შეადგენს 100ბ/სმ. ელექტროდებს შორის მანძილის გარბენას სჭირ-

დება $t = \frac{d}{Eu_p}$ დრო. $n-G_e$ -თვის $u_p = 1700$, ამიტომ, როდესაც $d = 5 \cdot 10^{-3}$ სმ, მაშინ $t = 3 \cdot 10^{-8}$ წმ. ამრიგად, კრიტიკული სიხშირე

$\nu_{kp} \approx \frac{1}{2t} \approx 20$ მჰ, რაც ბევრად აღემატება ბრტყელი ტრანზისტორების

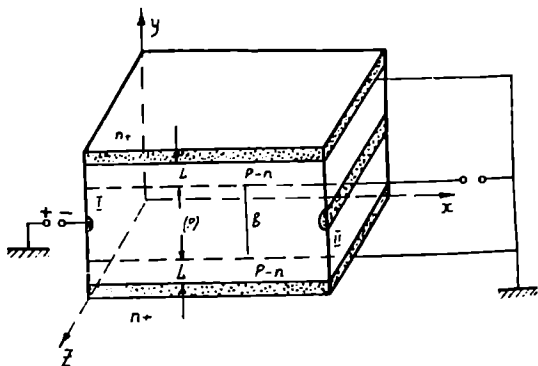
კრიტიკულ სიხშირეს. წერტილოვანი ტრანზისტორების მომუშავე ფართის სიმცირის გამო მათ იყენებენ მხოლოდ სპეციალური დანიშნულების შემთხვევაში.

§ 8. ველის ტრანზისტორი

ბიპოლარულ ტრანზისტორებში ბაზისა და კოლექტორის კონტაქტის გამტარებლობის ცვლილებას აწარმოებენ ბაზაში ინექტირებული არაძირითადი მატარებლები. დამუშავებულია აგრეთვე ტრანზისტორები, რომელთა მუშაობის პრინციპი აგებულია სულ სხვა პრინციპზე. ასეთი ტრანზისტორის სქემა ნაჩვენებია ნახ. 128-ზე. იგი შედგება ორი $n-G_e$ -ს ფენისაგან, რომელთა შორის მოქცეულია $p-G_e$ -ს ფენა. p ფენის ორივე ბოლოზე გაკეთებულია ომური კონტაქტები. ცხადია, $p-G_e$ -ს ფენაში გამავალი დენის სიდიდე დამოკიდებულია ამ ფენის გამტარებლობაზე (σ_p) და მის სისქეზე (b). თუ ზედა და ქვედა ფენებზე მოდებული გვექნება გარეგანი ძაბვა, ამ უკანასკნელის ცვლილების შედეგად შეიცვლება $p-n$ გადასვლის სიგანე, ე. ი. მოცულობითი მუხტების არე. შესაბამისად ამი-

სა, შეიცვლება $p-n$ ფენის ანდა p არხის სიგანე b და, მაშასადამე, არხში გამავალი დენის სიდიდეც. იმისათვის, რომ მოცულობითი მუხტების არე მოთავსებული იყოს მთლიანად p არეში, საჭიროა მასში დენის მატარებელთა კონცენტრაცია ბევრად ნაკლები იყოს, ვიდრე n არეებში. მაშინ, თანახმად (9.26) ფორმულისა, მოცულობითი მუხტების ფენის სისქე

$$L = \left(\frac{\kappa V_3 \gamma^2 L^2}{2\pi e^2 p_p} \right)^{1/2}$$



ნახ. 128

სადაც V_3 არის p და n არეებს შორის მიყენებული ველი არაგამშვებში მიმართულებით. თუ p ფენის სისქე ველის მოღებამდე იყო a , ველის მოღების შემდეგ იქნება b ,

$$b = a - 2L = a - \left(\frac{2\kappa V_3}{\pi e^2 p_p} \right)^{1/2} = a \left(1 - \sqrt{\frac{V_3}{V_0}} \right). \quad (12.46)$$

b ფენის გამტარებლობა ε ღერძის პარალელურ ერთეულ სიგრძეზე იქნება

$$G = \sigma_p \cdot \frac{b}{l} = \sigma_p \frac{a \left(1 - \sqrt{\frac{V_3}{V_0}} \right)}{l}, \quad (12.47)$$

სადაც l არის p ფენის სიგრძე და

$$V_0 = \left(\frac{\pi e^2 p_p a^2}{2\kappa} \right)^{1/2}, \quad (12.48)$$

ამრიგად, V_3 ძაბვის ცვლილებით შეიძლება ვცვალოთ p არხის გამტარებლობა და, მაშასადამე, მასში გამავალი დენის სიდიდეც. მიღებულია შემ-

დები ტერმინოლოგია: n ფენას უწოდებენ ჩამკეტს, p ფენას — არხს, პირველ ელექტროდს, საიდანაც დენი შემოდის — ჩასავალს, ხოლო მეორე ელექტროდს — ამოსავალს. თანახმად (10.47) ფორმულისა, როდესაც $V_0 = V_0$ გამტარებლობა არხისა $G=0$, ამ დროს არხში დენი არ გადის. ძაბვის შემდგომი გადიდებისას დენი პრაქტიკულად არ იცვლება. p არხის სისქეს a -ს ისე არჩევენ, რომ V_0 იყოს ნაკლები, ვიდრე გამრღვევი ძაბვა.

ადვილი საჩვენებელია, რომ ჩამკეტზე ძაბვის მცირე ცვლილებას ეთანადება არხში გამავალი დენის საგრძნობი მოდულაცია, რომელიც ბევრად აღემატება ჩამკეტზე ძაბვის ცვლილებას, ამიტომ ასეთი ხელსაწყო მოქმედებს როგორც გასაძლიერებელი. აქ შესაძლებელია გაძლიერება როგორც დენის, ისე ძაბვის მიხედვით. გარდა ამისა, კრიტიკული სიხშირეც ძალზე დიდია $\nu_{kp} \approx 100$ მპ. ხშირად ასეთ ტრანზისტორებს უწოდებენ უნიპოლარულს, რადგანაც მისი მუშაობის პრინციპი დამოკიდებულია მხოლოდ ერთი რომელიმე ნიშნის მუხტების მოძრაობაზე. არსებობს მრავალი სხვადასხვა კონსტრუქცია ელვის ტრანზისტორებისა, რომელთა განილვას ჩვენ აქ არ შეუვლდებათ.

ფოტოტრანზისტორი. განვიხილოთ $p-n-p$ ტრანზისტორი. დაეუშვათ, რომ ბაზურ არეს ვაშუქებთ სინათლის კვანტებით, რომელთა ენერგია $h\nu \geq E_g$. ამ დროს გენერირებული ელექტრონ-ხვრელებიდან ელექტრონები მყისვე ჩაიჭირებიან ემიტერ-ბაზის საზღვარზე მდებარე ხვრელებთან, რის შედეგად ემიტერ-ბაზაზე ბარიერის სიმაღლე საგრძნობლად შემცირდება. ბარიერის სიმაღლის შემცირებისას ემიტერიდან ბაზურ არეში მოხდება დიდი რაოდენობის ხვრელების ინექცია, რომელიც შემდეგ აღმოჩნდება კოლექტორში და მოგვცემს სათანადო გაძლიერებას.

§ 9. ოპტოელემენტარული ხელსაწომები

ელექტრონიკის იმ ნაწილს, რომელიც სწავლობს სინათლის ენერგიის გარდაქმნას ელექტრულში და პირიქით, ეწოდება ოპტოელექტრონიკა. ჩვენ ქვემოთ განვიხილავთ ზოგიერთი ოპტოელექტრონული ხელსაწყოს მუშაობის პრინციპს, რომელსაც საფუძვლად უდევს $p-n$ გადასვლა.

1. **ფოტორეზისტორი** (ფოტოწინააღმდეგობა) ფოტორეზისტორი წარმოადგენს G_e -ს ბრტყელ ფირფიტას, ანდა თხელ ფირს, რომლის ორივე ბოლოზე გაკეთებულია ომური კონტაქტები. ომურ კონტაქტებს შორის არსად არა გვაქვს $p-n$ გადასვლის ფენა, როდესაც ფოტორეზისტორის ზედაპირს ეცემიან სინათლის კვანტები (ფოტონები), რომელთა ენერგია $h\nu \geq E_g$, სადაც E_g არის მოცემული მასალის აკრძალული ზონის სიგანე, ისინი წარმოშობენ დამატებით დენის მატარებლებს — ელექტრონ-ხვრელებს, რის შედეგად გაიზრდება ნიშნის გამტარებლობა ელექტროგამტარებლობის კოეფიციენტი

$$\sigma_0 = e(n_0 u_n + p_0 u_p), \quad (12.49)$$

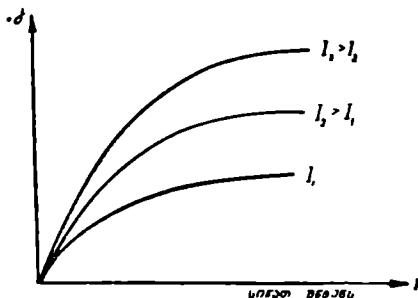
სადაც n_0 , p_0 არის ღენის მატარებელთა კონცენტრაცია გაშუქებამდე. ხშირად σ_0 -ს უწოდებენ ბნელ გამტარებლობას (გამტარებლობა, რომელიც ეთანადება სითბური ფლუქტუაციის შედეგად წარმოშობილ წყვილებს T ტემპერატურაზე). თუ სინათლის კვანტები მოცულობის ერთეულში ერთ წამში კმნიან დამატებით Δn და Δp ელექტრონ-ხვრელს, მაშინ ნიმუშის გამტარებლობა გახდება

$$\sigma = e(n_0 + \Delta n) u_n + e(p_0 + \Delta p) u_p = \sigma_0 + \Delta \sigma,$$

სადაც

$$\Delta \sigma = e(\Delta n \cdot u_n + \Delta p \cdot u_p). \quad (12.50)$$

დამატებით გამტარებლობას $\Delta \sigma$ -ს, რომელიც წარმოიშობა სინათლის კვანტების მოქმედებით, ეწოდება ფოტოგამტარებლობა. სინათლის ინტენსივობის გადიდებით ფოტოგამტარებლობა იზრდება, რადგანაც იზრდება გენერირებული ელექტრონ-ხვრელების რიცხვი, მეორე მხრივ, წყვილების რიცხვის გადიდებით იზრდება შებრუნებული პროცესი — წყვილების რეკომბინაცია. ამ ორი ერთმანეთის საწინააღმდეგოდ მიმართული პროცესის შედეგად დამყარდება წონასწორობა, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 129-ზე. ღენის ძალა იზრდება სინათლის ინტენსივობის კვადრატული ძირის პროპორციულად



ნახ. 129

$$J \sim \sqrt{I}.$$

ზოგიერთი მასალიდან დამზადებული ფოტორეზისტორი ძალიან მგრძნობიარეა გაშუქების მიმართ, ამიტომ თუ ასეთი ფოტორეზისტორი წინასწარ დაგრაღირებულაა სხვადასხვა ინტენსივობის გაშუქების მიხედვით, მაშინ იგი შეიძლება გამოყენებული იქნეს სუსტი გამოსხივების ანდა შორს მდებარე საგნების გამოსხივების დასადგენად. გამოსხივების სიდიდის მიხედვით დავადგინოთ სათანადო საგნების მდებარეობა. ფოტორეზისტად გამოყენებულია შემდეგი მასალები: გერმანიუმი, სილიციუმი, გოგირდოვანი ნაერთები, აგრეთვე Bi_2Se_3 , $PbTe$ და ა. შ. თხელი ფირები ფოტომგრძნობიარეა შორეულ ინფრაწითელ არეში 4 მკმ-მდე. ტემპერატურის დაწევით ფოტომგრძნობიარობის არე იწვევს გრძელი ტალღების არეში.

2. ფოტოდიოდი. ელექტრონიკაში ფართო გამოყენება აქვს ფოტოდიოდს, რომელიც ფოტორეზისტორისაგან განსხვავდება იმით, რომ

ომურ კონტაქტებს შორის მოთავსებულია $p-n$ გადასვლის ფენა, რომელზედაც მოდებულია ჩამკეტი მიმართულებით საკმარისად დიდი ძაბვა. როგორც ვიცით, როდესაც $p-n$ გადასვლაზე მოდებულია ჩამკეტი მიმართულებით ძაბვა, მაშინ $p-n$ გადასვლის საზღვრებზე არაძირითადი მატარებლების კონცენტრაცია ეცემა უფრო დაბლა წონასწორულ კონცენტრაციასთან შედარებით. ამ დროს სითბური გენერაცია მეტი გახდება, ვიდრე წყვილების რეკომბინაცია, რის შედეგად ელექტრონ-ხვრელების კონცენტრაცია გაიზარდება მათი სითბური წონასწორობის შესაბამის მნიშვნელობამდე. ამ დროს სითბური გენერაციის შედეგად შექმნილი წყვილები გადადიან იმ მხარეში, სადაც ისინი ძირითად მატარებლებს წარმოადგენენ. მაგ. n არის საზღვარზე შექმნილი ელექტრონები რჩებიან n არეში, ხოლო ხვრელები გადადიან p არეში. ელექტრონებისა და ხვრელების ასეთ მოძრაობას ეთანადება დენი ჩამკეტი მიმართულებით, რომელიც მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$J_{s0} = e \left(\frac{p_n \cdot l_p}{\tau_p} + \frac{n_p \cdot l_n}{\tau_n} \right).$$

თუ ახლა $p-n$ ფენის მახლობლად მოვახდენთ $h\nu \geq E_g$ სინათლის კვანტებით გაშუქებას, მაშინ გენერირებული წყვილები დიფუზური განარბენის მანძილზე რეკომბინირდებიან. მაგრამ, თუ წყვილების წარმოშობის ადგილი $p-n$ გადასვლის ფენიდან დაშორებულია დიფუზური განარბენის მანძილზე უფრო ახლო, მაშინ გენერირებული წყვილების მხოლოდ ნაწილი მიაღწევს რეკომბინაციის გარეშე $p-n$ გადასვლის ფენამდე. ეს უკანასკნელი კი, ელექტრონ-ხვრელს დააშორებს ერთმანეთს, ისე როგორც სითბური გენერაციით წარმოშობილ წყვილებს. ელექტრონი გადავა n არეში, ხვრელი კი — p არეში და ამრიგად, ჩამკეტი მიმართულებით გაიზარდება დენის მნიშვნელობა

$$J_s = e \left(\frac{l_p}{\tau_p} (p_0 + \Delta p) + \frac{l_n}{\tau_n} (n_0 + \Delta n) \right) = J_{s0} + e \left(\frac{l_p}{\tau_p} \Delta p + \frac{l_n}{\tau_n} \Delta n \right),$$

სადაც τ_n და τ_p არის სიცოცხლის ხანგრძლივობა ელექტრონისა და ხვრელისა სათანადოდ, ამიტომ შეგვიძლია დავწეროთ

$$\Delta n = G \tau_n \quad \text{და} \quad \Delta p = G \tau_p,$$

სადაც G არის წყვილების რაოდენობა, რომელსაც ქმნიან სინათლის კვანტები 1 სმ³ მოცულობაში დროის ერთეულში. ამგვარად,

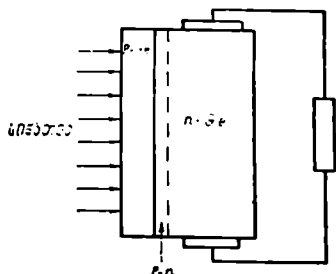
$$J_s = J_{s0} + eG(l_n + l_p). \quad (12.51)$$

მეორე წევრი წარმოადგენს ფოტოდენს, რომლის სიდიდე პირდაპირპროპორციულია სინათლის ინტენსივობისა ($G \sim J$) და დენის მატარებელთა დიფუზური განარბენისა. ასეთ რეჟიმში მომუშავე ხელსაწყოს, რომელიც

შეიცავს $p-n$ გადასვლის ფენას, ფოტოდიოდს უწოდებენ. ამგვარად, ფოტოდიოდი წარმოადგენს ხელსაწყოს, სადაც $p-n$ გადასვლა გამოყენებულია სინათლის ენერგიის უშუალოდ ელექტრულში გარდასაქმნელად.

3. ფოტოელემენტი — ფოტოვოლტაური ელემენტი. გახსნილი წრედის შემთხვევაში ფოტო-დიოდი წარმოადგენს ელექტრომომძრავებელი ძალის წყაროს. მართლაც, $p-n$ გადასვლის მაქსიმალურ სინათლეთი გენერირებული წყვილები, რომლებიც რეკომბინაციის გარეშე მიაღწევენ $p-n$ გადასვლის ფენას, ეს უკანასკნელი მათ დააშორებს ერთმანეთს: ზერელები გადავლენ p არეში, ხოლო ელექტრონები — n არეში და სათანადოდ დამუხტავენ მათ დადებითად და უარყოფითად. ამგვარად n და p არეებს შორის შეიქმნება გარკვეულ პოტენციალთა სხვაობა (გე-ლი), რომელიც მიმართულია $p-n$ გადასვლის ველის საწინააღმდეგოდ და სიდიდით გაუტოლდება ერთმანეთს წონასწორობის დამყარებისას. p და n არეებს შორის წარმოშობილ პოტენციალთა სხვაობას უწოდებენ ფოტოელექტრომომძრავებელ ძალას. თუ ახლა წრედს შევკრავთ, მივიღებთ მყის ღენს, რომელსაც მოკლე ჩართვის ღენს უწოდებენ. ასეთ რეჟიმში მომუშავე სინათლის გარდამქმნელს უწოდებენ ფოტოელემენტს ანდა ფოტოვოლტაურ ელემენტს. ეს უკანასკნელი ფოტოდიოდისაგან განსხვავდება იმით, რომ მასზე გარე-

განი ძაბვა არ არის მოდებული. იგი თვითონ შეადგენს ძაბვის წყაროს — ელექტრომომძრავებელი ძალის წყაროს. ეფექტის გასაძლიერებლად $n - G_e$ -ს ზედაპირზე აფენენ $p - G_e$ -ს თხელ ფენას (ანდა შებრუნებით) ისე, რომ გაშუქების ზედაპირიდან $p-n$ გადასვლის ფენამდე მანძილი ბევრად ნაკლები იყოს ღენის მატარებელთა დიფუზიურ გადარბენაზე (ნახ. 130). ამ შემთხვე-

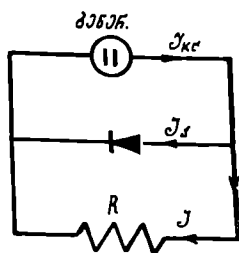


ნახ. 130

ვაში ზედაპირის მთელ ფართზე გენერირებული წყვილების უმეტესი ნაწილი რეკომბინაციის გარეშე მივლენ $p-n$ გადასვლის ფენამდე, სადაც ეს უკანასკნელი მათ დააცილებს ერთმანეთს და წრედში მიიღება საკმარისად დიდი ღენი. ასეთ ფოტოელემენტებს ძალზე დიდი გამოყენება აქვთ, განსაკუთრებით კოსმოსურ გამოკვლევებში, რადგანაც რადიოელექტრონული სკემების კვებისათვის საჭირო ენერგიის მიწოდება აკუმულატორების ან სხვა რაიმე სახით მეტად უხერხულია წონისა და გაბარიტის გაზრდის გამო. ამიტომ კოსმოსურ ხომალდებში რადიოელექტრონული აპარატების კვება ხდება სწორედ ასეთი ფოტოელემენტების საშუალებით, რომელსაც მზის სხივების ენერგია უშუალოდ გადააქვს ელექტრულში.

§ 10. ფოტოელემენტის ფოტოელემენტარული მოქმედებები
ძალის გამომავალი

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, $p-n$ ფენის მახლობლად სინათლის კვანტებით შექმნილი წყვილები $p-n$ გადასვლის ველით დაშორდებიან ერთმანეთს და გადავლენ იმ არეებში, სადაც ისინი წარმოადგენენ ძირითად მატარებლებს. როდესაც წრედი შეკრული არ არის, p და n უბნებზე წარმოშობენ გარკვეულ პოტენციალთა სხვაობას U -ს, რომელიც $p-n$ გადასვლის ველის საწინააღმდეგოდ არის მიმართული. სხვანაირად რომ ვთქვათ, U ველი მოედებულია $p-n$ გადასვლაზე გამშვები მიმართულებით, ამიტომ, თანახმად (11.38) ფორმულისა, ინექციის დენი იქნება ტოლი



ნახ. 131

$$J_s = J_{s0} \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right).$$

$p-n$ გადასვლის ფენა, როდესაც იგი სინათლის გაშუქების ქვეშ იმყოფება, შეიძლება განხილული იქნეს როგორც გენერატორი, რომელიც გვაძლევს დენს

$$J_{hc} = eG(l_n + l_p).$$

ეს დენი ნაწილობრივ იშუქდება ინექციის დენით, ამიტომ თუ წრედში გვექნება ჩართული რაიმე R დატვირთვა, მასზე გაძაღალი დენის სიდიდე მოიცემა შემდეგი ფორმულით (ნახ. 131)

$$J = J_{hc} - J_{s0} \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right). \quad (12.52)$$

როდესაც დატვირთვა არა გვაქვს $U=0$, მიიღება მოკლე ჩართვის დენი

$$J = J_{hc}$$

დატვირთვის არსებობის შემთხვევაში $U \neq 0$, ამიტომ მოკლე ჩართვის დენის სიდიდე შემცირდება ზემოთ მოცემული ფორმულის მიხედვით. p და n უბნების ბოლოებზე ბაქსიმალური ძაბვა მიიღება იმ შემთხვევაში როდესაც წრედი გახსნილია, ე. ი. $J=0$. ამ დროს, თანახმად (12.52) ფორმულისა, მიიღება

$$U_{\text{ბატ.}} = \frac{kT}{e} \ln \left(1 + \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}} \right). \quad (12.53)$$

$p-n$ გადასვლის ფენაში რეკომბინაციის გათვალისწინების შემთხვევაში

$$U_{\text{ბატ.}} = \frac{kT}{e} \ln \left(1 + \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}} (1 - \beta) \right). \quad (12.54)$$

მცირე ინტენსივობით სინათლით გაშუქების შემთხვევაში (G მცირეა) ლოგარითმის ქვეშ მოთავსებული სიდიდე შეიძლება დაეშალოს მწკრივად, ეს გვაძლევს

$$U \sim kT \frac{G(l_n + l_p)}{J_{s0}}.$$

ე. ი. ფოტოელექტრომამოძრავებელი ძალა სინათლის ინტენსივობის პირდაპირპროპორციულია.

ფოტოელემენტის მარგი ქმედების კოეფიციენტი

ჩვენ გვინტერესებს მაქსიმალური სიმძლავრე, რომელიც მოიხსნება R დატვირთვაზე.
სიმძლავრე

$$W = jU = U \left(eG(l_n + l_p) - J_{s0} \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right) \right).$$

ვუძებთ U -ს იმ მნიშვნელობას, რომელიც შეესაბამება U -ს მაქსიმუმს. W -ს მაქსიმუმის პირობას შეადგენს

$$\frac{dW}{dU} = eG(l_n + l_p) - J_{s0} \left(e^{\frac{eU}{kT}} - 1 \right) - J_{s0} \frac{eU}{kT} e^{\frac{eU}{kT}} = 0 \text{ როდესაც } U = U_m,$$

ანდა

$$eG(l_n + l_p) + J_{s0} = J_{s0} \left(1 + \frac{eU_m}{kT} \right) e^{\frac{eU_m}{kT}}.$$

აქედან

$$\frac{eU_m}{e^{\frac{eU_m}{kT}}} = \frac{\frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}} + 1}{1 + \frac{eU_m}{kT}},$$

$$\begin{aligned} J_m &= eG(l_n + l_p) - J_{s0} \left(e^{\frac{eU_m}{kT}} - 1 \right) = \\ &+ eG(l_n + l_p) + J_{s0} - \frac{eG(l_n + l_p) + J_{s0}}{1 + \frac{eU_m}{kT}} = \frac{eG(l_n + l_p) + J_{s0}}{1 + \frac{kT}{eU_m}}. \end{aligned}$$

ამრიგად

$$W_{max} = J_m \cdot U_m = J_m \frac{eG(l_n + l_p) + J_{s0}}{1 + \frac{kT}{eU_m}}.$$

ფოტოელემენტებზე დაცემული სიმძლავრე ტოლია

$$W_i = \frac{G(l_n + l_p)h\nu}{\alpha},$$

სადაც α არის შთანთქმის კოეფიციენტი, $h\nu$ — დაცემული კვანტის ენერგია. ფოტოელემენტის მარგი ქმედების კოეფიციენტისათვის მიიღება

$$\eta = \frac{W_{\max}}{W_i} = \alpha \epsilon U_m \frac{1 + \frac{J_{s0}}{eG(l_n + l_p)}}{1 + \frac{kT}{eU_m}} \cdot \frac{1}{h\nu}. \quad (12.54)$$

განვიხილოთ ამ ფორმულის ორი კერძო შემთხვევა:

ა) მცირე ინტენსივობით გასხივება $eG(l_n + l_p) \ll J_{s0}$.

ამ შემთხვევაში $eU_m \ll kT$, ამიტომ

$$\begin{aligned} e^{\frac{eU_m}{kT}} &\simeq 1 + \frac{eU_m}{kT} + \dots = \\ &= \frac{1 + \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}}}{1 + \frac{eU_m}{kT}} \simeq \left(1 + \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}}\right) \left(1 - \frac{eU_m}{kT}\right) \\ &= 1 - \frac{eU_m}{kT} + \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}} + \dots \end{aligned}$$

აქედან

$$\frac{2eU_m}{kT} \simeq \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}},$$

მარგი ქმედების კოეფიციენტისათვის გვექნება

$$\eta \simeq \frac{\alpha e U_m}{2h\nu}.$$

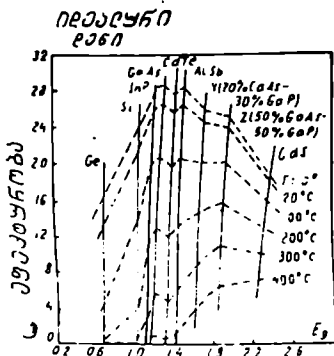
ბ) ძლიერი გაშუქების შემთხვევა $eG(l_n + l_p) \gg J_{s0}$. ამ დროს $eU_m \gg kT$, ამიტომ მარგი ქმედების კოეფიციენტისათვის გვექნება

$$\eta \simeq \frac{\alpha e U_m}{h\nu},$$

სადაც

$$eU_m \simeq kT \ln \frac{eG(l_n + l_p)}{J_{s0}}.$$

მზის სპექტრში კვანტების განაწილება ენერგიის მიხედვით მაქსიმალურია $1,1 - 1,5 \text{ eV}$ არეში. ამიტომ საუკეთესო მასალად ფოტოელემენტებისათვის უნდა შეადგენდეს $C_{60}A_8$, რომლის აკრძალული ზონის სიგანე დაახლოებით უდრის $1,4 \text{ eV}$. მაგრამ ამჟამად ფოტოელემენტებად ხმარობენ Si და Ge მასალას მათი ტექნოლოგიის კარგად დამუშავების გამო. ჭერჯერობით ამ მასალებზე დამზადებული ფოტოელემენტების მარგი ქმედების კოეფიციენტი არ აღემატებოდა 14% . ფოტოელემენტები ძირითადად გამოყენებულია კოსმოსური გამოკვლევებისათვის, ამიტომ მათ მოეთხოვებათ პირველ რიგში რადიაციის მიმართ მდგრადობა. ამ მხრივ მეტი უპირატესობა გააჩნია $C_{60}A_8$ მასალას, მაგრამ მათი ტექნოლოგია ნაკლებად არის დამუშავებული. ამიტომ $C_{60}A_8$ -მასალაზე გაკეთებული ფოტოელემენტები ჭერჯერობით ლაბორატორიულ კვლევით ხასიათს ატარებს.



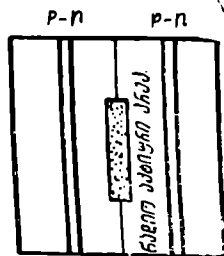
ნახ. 132

ნახ. 132-ზე ნაჩვენებია ფოტოელემენტების ეფექტურობის დამოკიდებულება დაცემულ სხივთა ინტენსივობაზე სხვადასხვა ტემპერატურის დროს სხვადასხვა მასალებზე. ამ ნახაზზე გადატანილი მრუდები შეესაბამებია იდეალურ შემთხვევას. ამიტომ $C_{60}A_8$ მასალებისათვის თეორიული მნიშვნელობა მარგი ქმედების კოეფიციენტისა აღწევს დაახლოებით 30% . ექსპერიმენტული მონაცემები კი ბევრად ნაკლებია ნახ. 132-ზე ნაჩვენები მნიშვნელობისაგან.

§ 11. რადიაციური გამოცხივების გარდაქმნა ელექტრულ ენერგიად

$p-n$ გადასვლა შეიძლება გამოყენებული იქნეს აგრეთვე ნებისმიერი გამოსხივების გარდასაქმნელად ელექტრულში. ამ მხრივ ყველაზე ხელსაყრელია β გამოსხივების გარდაქმნა, ეს უქანასკნელი ნაკლებად საშიშია მასალის გაფუჭებისათვის იმ შემთხვევაში, როდესაც γ , α და სხვა გამოსხივებანი გვაძლევენ მასალის მნიშვნელოვან გაფუჭებას. გამოსხივების წყაროს ათავსებენ ორ პარალელურ ფირფიტას შორის, რომლებიც შეიცავენ $p-n$ გადასვლის ფენას (ნახ. 132). β ელექტრონები, ისე როგორც სინათლის კვანტები, მასალის შიგნით გვაძლევენ ელექტრონ-ხვრელების გენერირებას, რომლებიც შემდეგ განცალდებიან $p-n$ გადასვლის ველის მოქმედებით და წრედში მიიღება ელექტრული დენი; ასეთი ფოტოელემენტი გაკეთებულ იქნა Ge -ს მასალაზე. β ელექტრონების წყაროდ გამო-

ყენებული იყო $S^{90} - Y^{90}$. ამ შემთხვევაში β ელექტრონების ენერგია შეადგენს $\sim 1,6 \cdot 10^6$ eV-ს. ასეთი ენერგიის თითოეული β ელექტრონი იძლევა ელექტრონ-ხერელის საკმარისად დიდ რაოდენობას, მაგრამ ამავე დროს წარმოშობენ გარკვეული რაოდენობის დეფექტებსაც (კვანტა შორის ატომებს და ვაკანსიებს). როდესაც ასეთი დეფექტების რაოდენობა გადააჭარბებს გარკვეულ რაოდენობას, $p-n$ გადასვლის ფენის მუშაობა ფუჭდება ანდა მთლიანად გამოდის მწყობრიდან. მიუხედავად ამისა, ასეთი ფოტოელემენტები გარკვეული მიზნებისათვის გამოყენებულია პრაქტიკაში



ნახ. 133

მცირე დოზით გამოსხივების შემთხვევაში. ამჟამად ამ მიმართულებით მიმდინარეობს ინტენსიური მუშაობა. აქ გადასაჭრელია სამი პრობლემა: 1) რადიოაქტიური მასალის შერჩევა, 2) რადიოაქტიური პრეპარატის განლაგება $p-n$ გადასვლის მიმართ, 3) გამმართავი ნივთიერების შერჩევა. რადიოაქტიური ნივთიერებები გვაძლევს სხვადასხვა სახის გამოსხივებას: β -გამოსხივებას, α -გამოსხივებას, ნეიტრონებისა და პროტონების გამოსხივებას, γ -გამოსხივებას და სხვა. მათ შორის ყველაზე ხელსაყრელია β წყაროს გამოყენება, ვინაიდან β გამოსხივება არის მაღალი

ენერგიის ელექტრონები, რომლებიც მოცემულ მასალაში წარმოშობენ დიდი რაოდენობით მეორად ელექტრონებს. მცირე მასის გამო ისინი ნაკლებად ანგრევენ მოცემულ მასალას, თუმცა გარკვეული დოზის შემდეგ წარმოქმნიან დეფექტების საკმარისად დიდ რაოდენობას, მაგ. $0,5 \text{ Mcu}$ ენერგიის ელექტრონები მთლიანად შთაინთქმებიან $0,03 \text{ სმ}$ სისქის მასალაში და დიდი დროის განმავლობაში წარმოშობენ $\sim 10^{15}$ სმ $^{-3}$ დეფექტებს. ხოლო რაც შეეხება სხვა დანარჩენ წყაროებს, ისინი მასალაში ძლიერად იჭრებიან (γ -გამოსხივება) და მოითხოვენ სათანადო დაცვის პირობების შექმნას, ანდა საგრძნობლად ანგრევენ მოცემულ მასალას (α გამოსხივება) და სხვა. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ამ მხრივ ყველაზე ხელსაყრელია $S^{90} - Y^{90}$, რომელიც β წყაროა და ნახევარდაშლის პერიოდში 28 წელს შეადგენს.

§ 12. ფოტოვოლტაური ეფექტის მიღების სხვადასხვა საშუალებანი

1. $p-n$ გადასვლა, რომელიც მიიღება მასალის ორმაგი ლეგირებით, ამ შემთხვევაში ბარიერის სიმაღლე

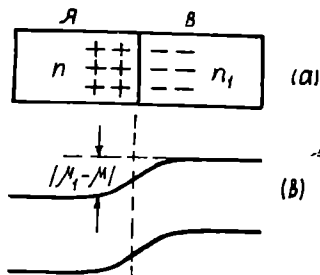
$$\varphi = kT \ln \frac{n p}{n_i^2}.$$

2. ბარიერი, რომელიც დაკავშირებულია მასალის არაერთნაირ ლეგირებასთან. დავუშვათ, რომ მასალის ერთი უბანი მეტად არის ლეგირებული, მაგალითად, დონორებით, ვიდრე მეორე უბანი (ნახ. 134ა). მივიღოთ, რომ დონორები მთლიანად იონიზირებულია, მაშინ A უბანზე თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაცია n მეტი იქნება, ვიდრე B ნაწილში n_1 .

$$n = N_c e^{-\frac{|\mu|}{kT}},$$

$$n_1 = N_c e^{-\frac{|\mu_1|}{kT}}.$$

დიფუზიის გამო ელექტრონები გადადიან მეტი კონცენტრაციის უბნიდან ნაკლებისაკენ. ხოლო, რაც შეეხება დონორის დადებით იონებს, ისინი მოცულობის შიგნით უძრავნი არიან. A -დან B -ში ელექტრონების გადასვლისას A უბანი დაიძუტება დადებითად, B კი — უარყოფითად, ეს კი წარმოშობს ველს მიმართულს A -დან B -კენ. ასეთი ველი ხელს შეუშლის ელექტრონების შემდგომ დიფუზიას A -დან B -კენ და წონასწორობა დამყარდება მაშინ, როდესაც წარმოშობილი ველი მთლიანად არ შეაჩერებს ელექტრონების დიფუზიას A -დან B -კენ. ამ ველის (ბარიერის) სიმაღლე ადვილად მიიღება იმ პირობიდან, რომ წონასწორობის დროს A და B უბნებზე ქიმიური პოტენციალები ერთი და იმავე დონეზე უნდა იყოს, შედეგად ამისა ზონა გაიღუნება ისე, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 134ბ-ზე, ბარიერის სიმაღლე



ნახ. 134

$$|\mu_1 - \mu| = kT \ln \frac{n}{n_1}. \quad (a)$$

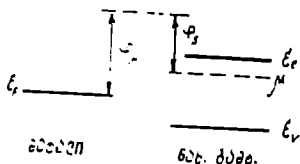
ისე როგორც $p-n$ გადასვლის შემთხვევაში, არაერთგვაროვანი ლეგირებით მიღებული ბარიერი შეიძლება გამოყენებული იქნეს გამოსხივების ენერგიის გარდასაქმნელად ელექტრულში. მაგრამ ასეთი გზით მიღებული ბარიერის სიმაღლე დიდი არ იქნება, რადგანაც პრინციპულად შეუძლებელია მცირე მანძილზე $\frac{n}{n_1}$ შეფარდება დიდი

იყოს. თუ B ნაწილის ლეგირებას მოვახდენთ აქცეპტორებით, მაშინ ელექტრონების რიცხვი ამ უბანზე შემცირდება შეტანილი აქცეპტორების

პროპორციულად $n_1 p = n_i^2$, აქედან $n_1 = \frac{n_i^2}{p}$. ამ უკანასკნელის შეტანა (ა) ფორმულაში გვაძლევს

$$\varphi = kT \ln \frac{n p}{n_i^2},$$

რომელიც ემთხვევა $(p-n)$ გადასვლის ფორმულას. ამგვარად, არაერთ-გვაროვანი ლეგირების კერძო შემთხვევას შეადგენს $p-n$ გადასვლა.



ნახ. 135

3. შოტკის ბარიერი. შოტკის ბარიერი მიიღება ნახევარგამტარ მეტალის შეხების ადგილზე. ეს ბარიერი შეიძლება გამოყენებული იქნეს ფოტოვოლტაური ეფექტის მისაღებად.

ნახ. 135-ზე მოცემულია შოტკის ბარიერის ენერგეტიკული სქემა. აქ φ_M არის გამოსვლის მუშაობა მეტალიდან, ხოლო φ_s — ნახევარგამტარიდან

როდესაც $\varphi_M > \varphi_s$ — წარმოიშობა შოტკის ბარიერი ელექტრონებისათვის

" $\varphi_M < \varphi_s$ " " " ხვრელებისათვის

შოტკის ბარიერის სიმაღლე $\psi = \varphi_M - \varphi_s$

შოტკის ბარიერში გამავალი დენის სიმკვრივე მოიცემა შემდეგი ფორმულით.

$$J = J_0 e^{-\frac{\varphi}{kT}} \left(e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right),$$

სადაც

$$J_0 \simeq 120 T A / \text{მ}^2.$$

§ 13. მოცულობითი ფოტოვოლტაური ეფექტი (დემიგერის ეფექტი)

როდესაც ნახევარგამტარის რომელიმე უბანს ვაშუქებთ სინათლის კვანტებით, რომელთა ენერგია $h\nu \geq E_g$, მოცულობის ადგილზე ელემენტში წარმოიქმნება ელექტრონ-ხვრელები, რომელნიც დიფუზიის გზით იმოძრავენ დაბალი კონცენტრაციის უბნისაკენ, მაგრამ რადგანაც ხვრელების ძვრადობის კოეფიციენტი ნაკლებია ელექტრონის ძვრადობის კოეფიციენტზე, ამიტომ ელექტრონები გაუსწრებენ ხვრელებს და გაშუქების ადგილის მახლობლად უბანი დიმიუხტება დადებითად, ხოლო მომდევნო უბანი — უარყოფითად. ეს უკანასკნელი შექმნის ელექტრულ ველს, რომელიც ააჩქარებს ხვრელებს და ამუხრუქებს ელექტრონებს. ბოლოს, დიფუზური განარბენის მანძილზე ისინი დაუახლოვდებიან ერთმანეთს და ამრიგად

მოხდება მათი რეკომბინაცია. ასეთი სურათი პერიოდულად განმეორდება სინათლის განუწყვეტელი მოქმედების გამო. ამ ეფექტს დეემბერის ეფექტს უწოდებენ. ჩვენ ქვემოთ მოვიყვანთ დეემბერის ველის მნიშვნელობის გამოთვლას იმ შემთხვევაში, როდესაც ნიშნულში არ შეიცავს ჩამკერ ცენტრებს და, მაშასადამე, ელექტრონი და ხერელის რეკომბინაცია ხდება მხოლოდ მათი უშუალო შეერთებით, ამიტომ მათი სიცოცხლის ხანგრძლივობა ერთმანეთის ტოლია.

დავწეროთ ელექტრონული და ხერელური დენების გამოსახულება

$$j_n = e(n_0 + \Delta n) u_n E_d + e D_n \frac{d}{dx} \Delta n, \quad (12.56)$$

$$j_p = e(p_0 + \Delta p) u_p E_d - e D_p \frac{d}{dx} \Delta p,$$

სადაც n_0 , p_0 — არის ელექტრონებისა და ხერელების საწყისი კონცენტრაცია,

$\Delta n = \Delta p$ — დამატებითი კონცენტრაცია დენის მატარებლებისა, შექმნილი სინათლის კვანტებით,

E_d — საძიებელი დეემბერის ველი.

სტაციონარულ შემთხვევაში სრული დენი ნულის ტოლია. ეს გვაძლევს

$$j = j_n + j_p = e(n_0 u_n + p_0 u_p) E_d + e \Delta n (u_n + u_p) E_d + \\ + e(D_n - D_p) \frac{d\Delta n}{dx} = 0.$$

მაგრამ $e(n_0 u_n + p_0 u_p) = \sigma_0$ — გამტარებლობა გაშუქებამდე და $D = \frac{kT}{e} u$ — აინშტაინის თანაფარდობის გამო.

ამრიგად დეემბერის ველი E_d მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$E_d = -kT \frac{u_n - u_p}{u_n + u_p} \cdot \frac{\frac{d}{dx} \Delta n}{a + \Delta n},$$

სადაც

$$a = \frac{\sigma_0}{e(u_n + u_p)}.$$

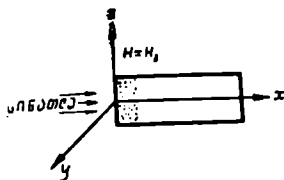
ინტეგრალი $\int E_d dx$ აღებული გაშუქების წერტილიდან ნიშნულების გასწვრივ სიბნელეში (ე. ი. სადაც გაშუქება არა გვაქვს) მოგვცემს დეემბერის ელექტრომაგნიტურ ძალას

$$\begin{aligned}
 V_D &= \int_1^2 E_a dx = -kT \frac{n_n - u_p}{u_n + u_p} \int_1^2 \frac{\frac{d}{dx} \Delta n}{a + \Delta n} = \\
 &= kT \frac{u_n - u_p}{u_n + u_p} \ln \frac{a + \Delta n_{cr}}{a} \simeq kT \frac{u_n - u_p}{u_n + u_p} \ln \left(1 + \frac{\sigma_{cr}}{\sigma_0} \right) \simeq \\
 &= kT \cdot \frac{u_n - u_p}{u_n + u_p} \ln \frac{\sigma_{cr}}{\sigma_0} \quad (12.57)
 \end{aligned}$$

ამრიგად, დეემბერის ფოტოელექტრომამოძრავებელი ძალა პირდაპირპროპორციულია გაშუქებული და ბნელი არეების გამტარებლობათა შეფარდების ლოგარითმისა.

აქედან შეიძლება გავაკეთოთ შემდეგი დასკვნა: თუ გვინდა მივიღოთ საკმარისად დიდი ფოტოელექტრომამოძრავებელი ძალა V_D , ამისათვის საჭიროა შეფარდება σ_{cr}/σ_0 რაც შეიძლება დიდი იყოს, ანდა მოცემული σ_{cr} -თვის σ_0 უნდა იყოს ძალიან მცირე. მეორე მხრივ, მცირე σ_0 -ს შემთხვევაში შეკრულ წრედში დენის მნიშვნელობა იქნება ძალზე მცირე. მაშასადამე, პრინციპულად შეუძლებელია დეემბერის ეფექტიდან მივიღოთ სასურველი სიდიდის სიმძლავრე.

1. ფოტომაგნიტური ეფექტი. ვთქვათ, ნახევარგამტარს ვაშუქებთ სინათლის კვანტებით, რომელთა ენერგია $h\nu \geq E_g$, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ. 136-ზე. წარმოშობილი ელექტრონ-ხვრელები მოძრაობენ Ox ღერძის მიმართულებით — მეტი კონცენტრაციის ადგილიდან ნაკლებისაკენ. თუ Ox ღერძის მიმართულებით მოვღებთ მაგნიტურ ველს, მაშინ მოძრავ მუხტებზე იმოქმედებს ლორენცის ძალა



$$F = \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}.$$

ნახ. 136

ეს ძალა ელექტრონებს გადახრის Oy ღერძის საწინააღმდეგოდ, ხოლო ხვრელებს Oy ღერძის მიმართულებით. ამის

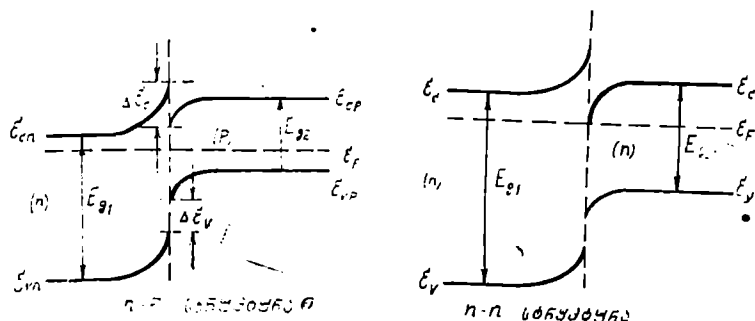
შედეგად წარმოიშობა Oy ღერძის მიმართულებით ფოტოელექტრომამოძრავებელი ძალა (ფ. ე. მ.), ამ ეფექტის სიდიდე დამოკიდებულია გაშუქების ინტენსივობის სიდიდეზე და ზედაპირული რეკომბინაციის სიდიდეზე.

2. ანომალიური ფოტო-ვოლტური ეფექტი. ზოგიერთ ნახევარგამტარულ თხელ ფირებში შემჩნეულია ანომალიურად დიდი ფოტოელექტრომამოძრავებელი ძალა (ფ. ე. მ.). ამ მოვლენის ზუსტი (დამაჯერებელი) ახსნა ჯერჯერობით არ არსებობს. ამჟამად მიღებულია ამ მოვლენის

შემდეგი ახსნა: თხელი ფირის ზრდის დროს შექმნილია ისეთი პირობები, რომ მთელ მოცულობაში მიიღება $p-n$ გადასვლების სისტემა, რომლებიც ერთმანეთს აძლიერებენ, რის შედეგად მიიღება ფოტოელექტრომა-
მოძრავებელი ძალა რამდენიმე ათასი ვოლტის რიგისა. სამაგიეროდ ფირის წინააღმდეგობა უზარმაზარია $\sim 10^{10} - 10^{14} \Omega$, ამიტომ ასეთი ელემენტიდან დენის მიღება არ შეიძლება. არის სხვა ვარიანტები აღნიშნული ეფექტისა, მაგრამ არც ერთი მათგანი არ იძლევა საშუალებას აეხსნათ ყველა დაკვირვებადი ფაქტი. დამზერილია აგრეთვე ის ფაქტი, რომ ეს ეფექტი მიიღება არა კონტაქტის მახლობლად, არამედ ფირის მთელ სიგრძეზე და სხვა.

§ 14. ჰეტეროგადასვლები

ჩვენ აქამდე ვიხილავდით ერთი და იმავე მასალაში ორი სხვადასხვა გამტარებლობის უბნების გარდამავალ ფენას, $p-n$ გადასვლის ფენას, რომელსაც ხშირად ჰომოგადასვლებს უწოდებენ. ამ უკანასკნელ ხანებში ფართო გამოყენება ჰპოვა აგრეთვე ჰეტეროგადასვლებმა, რომლებიც მიიღებიან ორი სხვადასხვა მასალის (აკრძალული ზონის) კონტაქტის საშუა-



ნახ. 137

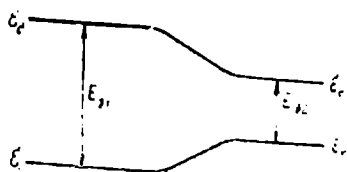
ლებით. თუ ეს მასალები ერთმანეთში იხსნება, მაშინ მიიღება მასალა, რომლის აკრძალულ ზონას ექნება იღებულის მასალების აკრძალული ზონის შორისული მნიშვნელობა, მათ ხშირად მყარ ხსნარებს უწოდებენ. თუ ეს მასალები ერთმანეთში გახსნილი არ არის და იმყოფებიან მხოლოდ შეხებაში, გარდამავალ ფენაში ზონის სურათი იქნება ისეთი, როგორიც ნაჩვენებია ნახ. 137-ზე.

ჰეტეროგადასვლების მაგალითია სისტემა: $Ge-Si$, $Ge-CdAs...$ ა. შ. მასალებს, რომლებიც აღგენენ ჰეტეროგადასვლებს, შეიძლება ჰქონდეს ერთი და იგივე ან სხვადასხვა ტიპის გამტარებლობანი, ასე მაგალითად:

Ge და C_nA_n -ის სისტემა იძლევა ოთხ შესაძლო სტრუქტურას: $\mu Ge - nC_nA_n$, $\mu Ge - pC_nA_n$, $pGe - \mu C_nA_n$ და $pGe - pC_nA_n$.

გარდამავალ ფენაში შეიძლება ადგილი ჰქონდეს ენერგიის წყვეტას ნახევარმსხრუტეებზე (ნახ. 137) ანდა უწყვეტ გადასვლებს, როგორც ეს ნახევრები ნახ. 138-ზე.

ჰეტეროგადასვლების თეორიული განსილვა გვიჩვენებს, რომ $p-n$ გადასვლის ნაცვლად ჰეტეროგადასვლების გამოყენება იძლევა თითქმის ყველა ნახევარგამტარული ხელსაწყო პარამეტრების გაუმჯობესებას და გარდა ამისა, ჰეტეროგადასვლების გამოყენებით შეიძლება ისეთი ნახევარგამტარული ხელსაწყოები შეექმნათ,



ნახ. 138

რომლებიც პრინციპულად შეუძლებელია გაკეთდეს $p-n$ გადასვლის გამოყენებით. ამიტომ ჰეტეროგადასვლები იძლევიან განვითარების უფრო მეტ პერსპექტივებს, ვიდრე $p-n$ გადასვლა. ამჟამად, ჰეტეროგადასვლების გამოყენება შეზღუდულია იმით, რომ ჭერჯერობით კარ-

გად არ არის დამუშავებული სუფთა ჰეტეროგადასვლების მიღების ტექნოლოგია, ვინაიდან გარდამავალ ფენაში მიიღება დეფექტების საკმარისად დიდი რაოდენობა, რომელიც უარყოფით გავლენას ახდენს ნახევარგამტარული ხელსაწყოების პარამეტრებზე. ჰეტეროგადასვლებზე არანაკლები მნიშვნელობა შეიძლება ექნეს მყარ ხსნარებს იმის გამო, რომ ისინი იძლევიან საშუალებას ნახევარგამტარების ყველაზე მნიშვნელოვანი პარამეტრის — აკრძალული ზონის სიგანის ცვლილებას, შემადგენელი კომპონენტის სათანადო პროცენტული შემადგენლობის ცვლილების გზით. ქვემოთ მოვიყვანთ ჰეტეროგადასვლების გამოყენების ზოგიერთ მაგალითს:

ა) დიოდური სტრუქტურა ჰეტეროგადასვლებზე

ყოველი ნახევარგამტარული ხელსაწყო ხასიათდება პარამეტრების გარკვეული რაოდენობით. მაგრამ როდესაც საკითხი ეხება ნახევარგამტარული ხელსაწყოების პარამეტრების გაუმჯობესებას, საჭიროა ვიცოდეთ, რომელი პარამეტრის გაუმჯობესება არის არსებითი მოცემული ხელსაწყოებისათვის. ნახევარგამტარული დიოდების შემთხვევაში არსებითია დიოდის მოქმედების სისწრაფის ან კრიტიკული სიხშირის გადიდება. ჩვეულებრივ დიოდებში, რომლის მუშაობის პრინციპი ეყრდნობა არამძირითადი მატარებლების ინექციას $p-n$ გადასვლის გამოყენებით და შემდეგ მათ რელაქსაციას მოცულობაში. კრიტიკულ სიხშირეს განსაზღვრავს არამძირითადი მატარებლების დიფუზიის კოეფიციენტი. ეს პროცესი შე-

დარებით ნელი პროცესია, ამიტომ დიოდის კრიტიკული სიხშირის სიდიდე შემოსაზღვრულია ამ ნელი პროცესით. შოტკის დიოდის გამოყენების დროს (შოტკის ბარიერი მიიღება მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე). დიოდის კრიტიკული სიხშირე იზრდება იმის გამო, რომ ამ შემთხვევაში დენის გადატანია ძირითადი მატარებლები, ამიტომ ეს პროცესი ბევრად უფრო სწრაფია, ვიდრე ზემოთ განხილული შემთხვევა. სრულიად ანალოგიური სიტუაცია იქნება იმ შემთხვევაში, როდესაც $p-n$ გადასვლის ნაცელად ვიყენებთ ჰეტეროგადასვლებს. თანახმად ნახ. 137-სა, ჰეტეროგადასვლაზე გვაქვს ბარიერის სიმაღლეების ცვლილება ΔE_c და ΔE_v სიდიდეებზე ელექტრონებისათვის და ხვრელებისათვის, სათანადოდ. ბარიერის სიმაღლის ცვლილებები მიიღებიან იმ შემთხვევაშიაც, როდესაც გვაქვს $n-n$ და $p-p$ სტრუქტურები. ასეთ გადასვლებს ხშირად იზოტოპიურ გადასვლებს უწოდებენ. ასეთი გადასვლების ბარიერის გამოყენებისას, ბარიერის სიმაღლეების ცვლილებასთან დაკავშირებით იქმნება ხელსაყრელი პირობები იმისათვის, რომ მოხდეს ერთი არიდან მეორეში ძირითადი მატარებლების (ელექტრონებისა და ხვრელების) ინექტირება. ამ თვალსაზრისით იგი ეკვივალენტურია შოტკის დიოდისა, ამიტომ ჰეტეროგადასვლების გამოყენების დროს იზრდება დიოდის კრიტიკული სიხშირე იმავე მიზეზებით, რაც შოტკის ბარიერზე. საკითხი იმის შესახებ, რომელი ბარიერი უფრო ხელსაყრელია, შოტკისა თუ ჰეტეროგადასვლების დროს შექმნილი, ამას გადაწყვეტს აღნიშნული ბარიერების მიღების ტექნოლოგიის სიმარტივე.

როგორც ვიცით, დიოდები ძირითადად იხმარება ცვალებადი დენების გამართვისათვის. არსებობს გამმართველები როგორც სუსტი ისე ძლიერი დენებისა. ძლიერი დენების გამმართველს მოეთხოვება გაუძლოს საკმარისად დიდ არაგამშვები მიმართულებით მოდებულ ძაბვას, რათა ადგილი არ ექნეს ელექტრულ გარღვევას. ამ საკითხის მარტივი გადაჭრის იდეა წამოყენებულ იქნა საბჭოთა მეცნიერის ალფეროვის მიერ. ამ იდეის შინაარსი მდგომარეობს შემდეგში: როგორც ვიცით $p-n$ გადასვლაზე მოდებული გამრღვევი ძაბვის სიდიდე დამოკიდებულია მოცულობითი მუხტების ფენის სიდიდეზე ($p-n$ გადასვლის ფენის), ხოლო ძაბვა, რომელიც მოდებულია $p-n$ გადასვლაზე გამშვები მიმართულებით, დამოკიდებულია ნეიტრალური არეების (n და p არეების) თვისებებზე. მაღალი გამრღვევი ძაბვის მისაღებად აუცილებელია მოცულობითი მუხტების არე იყოს ნახევარგამტარი დიდი აკრძალული ზონით, ხოლო გამშვები მიმართულებით შედარებით მცირე ძაბვის მისაღებად ნეიტრალურ არეებად გამოყენებული იქნეს ნაკლები სიგანის ნახევარგამტარი. ამის გამო აღფეროვმა $p-n$ გადასვლა შეცვალა ჰეტეროგადასვლით. მან მეორე, აგრეთვე მეტად ორიგინალური იდეა წამოაყენა. ცნობილია, რომ ძლიერი დენის გამმართველში გამშვები მიმართულებით დენის გატარების

სივრცე პერიოდში აღვილი აქვს მოცულობის შიგნით ინეექტირებული დენის მატარებელთა რეკომბინაციას არაძირითად მატარებლებთან, რის შედეგად მოცულობაში გამოიყოფა ენერგიის დიდი რაოდენობა სითბოს სახით. გამოყოფილი სითბოს რაოდენობის მოსაცილებლად მიმართავენ რთული მოწყობილობის გაცივების სისტემის შექმნას. სწორედ ეს გამოყოფილი სითბოს რაოდენობა შემოსაზღვრავს დიოდის მუშაობის საზღვრებს — დენის ზღვრულ მნიშვნელობას. ალფეროვმა $p-n$ გადასვლის ნაცვლად გამოიყენა ჰეტეროგადასვლა p^+in^+ სტრუქტურით. სადაც p^+ და n^+ არიან დიდი აკრძალული ზონის ნახევარგამტარები i არესთან შედარებით. i არე არის თითქმის საკუთარი გამტარებლობისა, რომელიც ხასიათდება მაღალი დიელექტრიკული მუდმივით. p^+ და n^+ არეები გამოყენებულია ემიტერებად, რომელთა საშუალებით ხდება დენის მატარებელთა ინექტირება i არეში. სწორედ i არე აქტიურია, სადაც მიმდინარეობს ძირითადად რეკომბინაციული გამოსხივებანი. თუ i არეში გამოსახულება ხდება კოპერენტული გამოსხივების რეჟიმში (ლაზერული გამოსხივება), მაშინ რეკომბინაციასთან დაკავშირებული გამოსხივებანი გაყვანილ იქნება i არიდან გარეშე სივრცეში და ამრიგად სითბოს გამოყოფა მოცულობის შიგნით ძალზე შემცირდება. მაღალი ჩამკეტი ძაბვის სიდიდეს შეიძლება შერჩეული იქნეს i არის სათანადო ლეგირებით.

ბ) ტრანზისტორული სტრუქტურა ჰეტეროგადასვლებზე

ტრანზისტორის თეორიაში არსებით პრობლემას წარმოადგენს როგორც სიმძლავრის, ისე კრიტიკული სიხშირის გადიდება, ამ საკითხის დადებით გადაწყვეტას იძლევა აგრეთვე ჰეტეროგადასვლების გამოყენება. პარამეტრების გაუმჯობესება დაკავშირებულია ჰეტეროგადასვლებზე ელექტრონებისა და ხვრელების შესაბამისი ბარიერის სიმაღლეების ცვლილებასთან (ნახ. 127). ამ მიზნით ემიტერად აღებულია დიდი აკრძალული ზონის ნახევარგამტარი. ამ დროს ბარიერის სიმაღლე ხვრელებისათვის იზრდება, ხოლო ელექტრონებისათვის მცირდება, რის გამოც ემიტერიდან ხდება ელექტრონების ინექცია ბაზაში, რისთვისაც სავალდებულო არ არის ემიტერი იყოს მეტად ლეგირებული ვიდრე ბაზა. ამ დროს ემიტერის ეფექტურობა თითქმის ერთის ტოლია. გარდა ამისა, ინექტირების კოეფიციენტი პრაქტიკულად დამოკიდებული არ არის ემიტერზე მოდებული ძაბვის სიდიდეებზე. ბაზის გამტარებლობის მოდულაციას მნიშვნელობა არა აქვს. რადგანაც ემიტერის ლეგირებას (კუთარ წინააღმდეგობას), გავლენა არა აქვს, ამიტომ მისი კუთრი წინააღმდეგობა შეიძლება დიდი ავილოთ, რის გამოც გაიზრდება ჩამკეტი ფენის სიგანე და, მაშასადამე, შესაბამისად გაიზრდება გამრღევეი ძაბვის მნიშვნელობა, სიხშირე და სხვა.

გ) გამოსხივების წყარო

ოპტოელექტრონიკის ერთ-ერთი ძირითადი ამოცანაა უწყვეტ რეჟიმში მომუშავე საკმარისად ძლიერი კოჰერენტული სინათლის მიღება. ამჟამად ამ საკითხის დადებითი გადაჭრა ხდება ლაზერული დიოდების გამოყენებით პეტეროგადასვლებზე. პეტეროლაზერის განსაკუთრებულ სტრუქტურას წარმოადგენს რეკომბინაციის, დასახლების ინვერსიის და კოჰერენტული გამოსხივების თავსებადობა მცირე აკრძალული ზონის ნახევარგამტარების ვიწრო ზოლში, რომელიც მოთავსებულია ორი ფართო აკრძალული ზონის ნახევარგამტარებს შორის. ამჟამად ასეთი სტრუქტურა განხორციელებულია სისტემაში $AlAs - GaAs$ საშუალებით, რომელიც გვაძლევს პეტეროგადასვლას სრულიად თავისუფალს დეფექტებისაგან.

ასეთი პეტეროგადასვლების საშუალებით მიღებულია $T = 300^\circ$ -ზე ზღვრული დენის მნიშვნელობა $\sim 5 \cdot 10^3$ ა/სმ². რაც ბევრად ნაკლებია დენის ზღვრული მნიშვნელობისა პომოგადასვლების გამოყენების დროს. ძლიერი სპონტანური გამოსხივების მისაღებად გამოყენებულ იქნა აგრეთვე პეტეროგადასვლები შემდეგ სტრუქტურებზე $GaAs - GaP$, $ZnSe - ZnTe$, $GaAs - InAs$ და სხვა.

გამოსხივების მიმდებარე განვიხილოთ ნახ. 138-ზე ნაჩვენები პეტეროგადასვლა. როდესაც პეტეროგადასვლის ფენას ვაშუქებთ $h\nu \geq E_{g1}$ სინათლის კვანტებით, ფოტონების შთანთქმის შედეგად წარმოიშობა ელექტრონ-ხვრელების დიდი რაოდენობა, რომლებიც ინექტირდება მეოთხე არეში, სადაც აკრძალული ზონის სიგანე ნაკლებია. ამიტომ ამ არეში მოხდება გამოსხივება ნაკლები სიხშირის კვანტებისა $h\nu = E_{g2}$, ანდა პირიქით, თუ ვაშუქებთ მეორე არეს $h\nu \geq E_{g2}$ ფოტონებით, მაშინ გენერირებულ ელექტრონ-ხვრელებს არ შეუძლიათ გადავიდნენ უფრო დიდი სიგანის აკრძალულ არეში, ამისათვის საჭიროა გარკვეული ველის მოღება. ამის შემდეგ მოხდება მათი რეკომბინაცია $h\nu = E_{g1}$ კვანტების გამოსხივებით. მაშასადამე, ასეთი პეტეროგადასვლები შეიძლება გამოყენებული იქნეს ერთი სიხშირის სხივების გარდასაქმნელად მეორე სიხშირის სხივებად: კერძოდ ხილული სხივები გარდაექმნათ უხილავში და პირიქით.

პეტეროგადასვლები შეიძლება აგრეთვე გამოყენებული იქნეს მზის ენერგიის გარდასაქმნელად. ის გარემოება, რომ პეტეროგადასვლების მასალების სათანადო შერჩევის გზით შეიძლება მივიღოთ ყველაზე ოპტიმალური მასალა (რომელიც მზის სპექტრის დიდ ნაწილს მოიცავს) სინათლის ენერგიის გარდასაქმნელად, გაიზრდება მარგი ქმედების კოეფიციენტი. ამჟამად, ზოგიერთ ნიმუშზე მიღებულია მარგი ქმედების კოეფიციენტი $\sim 8\%$. ცხადია პეტეროგადასვლების ტექნოლოგიის

აუქმობესება ბევრად გაზარდის მარტი ქმედების კოეფიციენტს. პეტერო-ვადასკლევი გამოიყენება აგრეთვე ინტრაწითელი სხივების მოდულაციისათვის და სხვა.

§ 15. კვანძური გამაძლიერებლები და მენიარტოზები

მაგნიტური რეზონანსის კვლევები იძლევა მრავალ საინტერესო ინფორმაციას ნივთიერებათა აღნაგობაზე, შიდა კრისტალურ მაგნიტური ველის ბუნებაზე და სხვა. მაგნიტური რეზონანსის პრინციპზე დაყრდნობით მიღებულ იქნა კვანტური გენერატორები და გამაძლიერებლები ზემაღალი სიხშირის (მახერი) და ოპტიკური სიხშირის (ლაზერი) არეალში, ფერომაგნიტური დეტექტორების, ბირთვების დაპოლარების მძლავრი მეთოდი და სხვა. სანამ გადავიდოდეთ კვანტური გენერატორებისა და გამაძლიერებლების მუშაობის პრინციპის განხილვაზე, საჭიროა უპირველეს ყოვლისა, გავეცნოთ უარყოფითი ტემპერატურების ცნებას და მისი მოღების საშუალებას.

განვიხილოთ N ნაწილაკებისაგან შემდგარი სპინ-სისტემა. სიმარტივისათვის მივიღოთ, რომ სპინი $s = \frac{1}{2}$. ამ შემთხვევაში მდგომარეობა

ორჯერადად გადაგვარებულია. მოვდეთ სპინ-სისტემას x ღერძის მიმართულებით გარეგანი მუდმივი მაგნიტური ველი H_0 , ეს უკანასკნელი მოხსნის გადაგვარებას, მივიღებთ ზეემანის ორ ღონეს. ღონეებს შორის მანძილი $\hbar\omega_0 = \gamma\hbar H_0$, ვინაიდან სპინ-სისტემა წონასწორობაში იმყოფება მესერთან, აღნიშნულ ღონეებზე დასახლებათა რიცხვი მოიცემა ბოლცმანის კანონით

$$\frac{n_{-1/2}^0}{n_{+1/2}^0} = e^{\frac{2\hbar\omega_0}{kT_0}} = e^{\frac{2\gamma\hbar H_0}{kT_0}}, \quad (12.59)$$

სადაც T_0 არის მესერის ტემპერატურა.

სპინ-სისტემას მოვდეთ აგრეთვე ცვალებადი მაგნიტური ველი $H = H_1 \cos \omega t$, სადაც $H_1 \ll H_0$, როდესაც $\hbar\omega = \hbar\omega_0$ ცვალებადი ველი გამოიწვევს გადასვლებს აღნიშნულ ღონეებს შორის. ამასთან ცნობილია, რომ გადასვლის ალბათობა ქვევიდან ზევით (შთანთქმა) უდრის გადასვლის ალბათობას ზევიდან ქვევით (გამოსხივება), ე. ი.

$$W\left(\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}\right) = W\left(-\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}\right).$$

მაგრამ, ვინაიდან ქვედა ღონეზე ბოლცმანის კანონის თანახმად დასახლება მეტია, ვიდრე ზედა ღონეზე, შთანთქმა მეტი იქნება გამოსხივებაზე. ამრიგად, სპინ-სისტემა შთანთქმავს ენერგიის გარკვეულ რაოდენობას ცვალებად

ბადი ველის წყაროდან (რეზონანსული შთანთქმა). შედეგად ამისა, სპინ-სისტემის წონასწორობა დაირღვევა მესერთან. მივიღოთ, რომ სპინ-სისტემაში წონასწორობა უფრო ადრე მყარდება, ვიდრე სპინ-სისტემასა და მესერს შორის. სხვანაირად რომ ვთქვათ, სპინ-სისტემა შეიძლება დასასიათებულ იქნეს T_s ტემპერატურით, რომელიც განსხვავებულია მესერის T_0 ტემპერატურისაგან ($T_s > T_0$). ამ შემთხვევაში დასახლებათა რიცხვი დონეებზე მოიცემა შემდეგი ფორმულით:

$$\frac{n_{-1/2}}{n_{1/2}} = e^{\frac{2\hbar\omega_0}{kT_s}} = e^{\frac{2\gamma H_0}{kT_s}} \approx 1 + \frac{2\gamma H_0}{kT_s}.$$

მეორე მხრივ

$$n_{1/2} + n_{-1/2} = N.$$

ამ ორი განტოლებიდან ვღებულობთ

$$n_{-1/2} = \frac{1}{2} N \left(1 + \frac{\gamma H_0}{kT_s} \right) \text{ და } n_{1/2} = \frac{1}{2} N \left(1 - \frac{\gamma H_0}{kT_s} \right).$$

ცვალებადი მაგნიტური ველის წყაროდან სპინ-სისტემის მიერ ერთ წამში შთანთქმული ენერგია ტოლია

$$P = \hbar\omega_0 W \cdot (n_{-1/2} - n_{1/2}) = \frac{(\hbar\omega_0)^2}{kT_s} N W. \quad (12.60)$$

ამ ფორმულის მარჯვენა მხარეზე მდგომი ყველა სიდიდე დადებითია, ამიტომ $P > 0$, ე. ი. სპინ-სისტემა შთანთქმავს ენერგიას. მაგრამ, თუ რაიმე გზით განვახორციელოთ $T_s < 0$ მიღება, მაშინ $P < 0$, რაც აღნიშნავს იმას, რომ გამოხსილება სჭარბობს შთანთქმას. ასეთი სისტემა შეიძლება გამოყენებული იქნეს როგორც გამაძლიერებელი. $P < 0$ ნიშნავს $n_{-1/2} > n_{1/2}$ ე. ი. უფრო მაღალ ენერგეტიკულ დონეზე დასახლება მეტია, ვიდრე დაბალ ენერგეტიკულ დონეზე. მეორე მხრივ, ზოლცმანის კანონის მისეღვით დასახლებათა რიცხვი

$$n \sim e^{-\frac{E_n}{kT}},$$

ე. ი. რაც მაღალია ენერგეტიკული დონე, სათანადო დონეზე დასახლებათა რიცხვი მცირდება. ცხადია, ნაკულისსმევი, რომ $T > 0$; მაგრამ თუ ვიგულისხმებთ, რომ $T < 0$, მაშინ დასახლებათა რიცხვი გაიზარდება ენერგიის ვადიდებით. ასეთ მდგომარეობას უწოდებენ უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობას. ამ პრინციპზე დაყრდნობით აგებულ იქნა კვანტური გამაძლიერებლები და გენერატორები (მაზერი და ლაზერი). უბირველეს ყოვლისა, გავარკვიოთ, შეიძლება თუ არა პრინციპულად განხორციელებული იქნეს უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობა. ამისათვის განვი-

ხილეთ სპინ-სისტემა, რომელზედაც მოდებულია გარეგანი ცვალებადი მაგნიტური ველი. ამ შემთხვევაში სპინ-სისტემის ტემპერატურის შეზღუდვებული სიდიდის ცვლილება დროის მიხედვით მოიცემა შემდეგი განტოლებით:

$$\frac{d}{dt} \beta_s = 2W\beta_s - \frac{\beta_s - \beta_0}{\tau}. \quad (12.61)$$

სადაც $\beta = \frac{1}{kT_s}$, $\beta_0 = \frac{1}{kT_0}$, τ არის სპინ-მესერის რელაქსაციის დრო და W — გადასვლის ალბათობა.

სტაციონარულ მდგომარეობაში $\frac{d\beta_s}{dt} = 0$, აქედან მიიღება

$$\beta_s = \beta_0 \frac{1}{1 + 2|W|\tau}. \quad (12.62)$$

რადგანაც $\beta_0 > 0$, ამიტომ $\beta_s \geq 0$ ნებისმიერ E_n -თვის. მოცემულ სიტუაციაში უარყოფითი ტემპერატურის ანდა გაძლიერების მიღება შეუძლებელია. ზოგადი მოსაზრების საფუძველზე შეიძლება გავაკეთოთ შემდეგი დასკვნა: თუ სისტემის ენერგეტიკული დონე ზევიდან შემოსაზღვრული არ არის, მაშინ ასეთი სისტემის ტემპერატურა იქნება დადებითი, ნებისმიერ პირობებში. მართლაც, სისტემის წონასწორობის შესაბამისი ნებისმიერი ფიზიკური სიდიდე განისაზღვრება სტატისტიკური ჯამით

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}. \quad (12.63)$$

თუ სისტემის ენერგეტიკული სპექტრი ზემოდან შემოსაზღვრული არ არის ($E_n \rightarrow \infty$), მაშინ (12.63) მწკრივის კრებადობისათვის აუცილებელია $T > 0$. მაგრამ, თუ სისტემის ენერგეტიკული სპექტრი ზემოდან შემოსაზღვრულია (ე. ი. E_n — სასრულო სიდიდეა), მაშინ შესაძლებელია Z კრებადი გახდეს $T < 0$ შემთხვევაშიაც. როგორც ვიცით, სპინ-სისტემაში ზეემანის დონეების რიცხვი სასრულოა, ამიტომ Z შეიძლება კრებადი იყოს (სადაც აჩაგვა წარმოებს ზეემანის დონეების მიმართ) $T < 0$ შემთხვევაშიაც. მაშასადამე, ასეთ სისტემაში შესაძლებელია უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობის განხორციელება.

ა) მაზერის მოქმედების პრინციპი

განვიხილოთ სპინ-სისტემა, რომელზეც გვაძლევს არაეკვიდისტანტურ სამ ენერგეტიკულ დონეს (ზეემანის დონეებს) $E_1 < E_2 < E_3$ (ნახ. 139). ენერგიის ასეთი სპექტრი გააჩნია აქსიალური სიმეტრიის კრისტალის სპინ-სის-

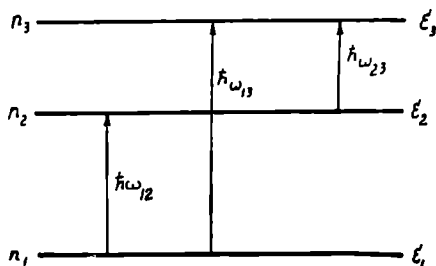
ტემას, რომელიც ხასიათდება ეფექტური სპინით $S_{\text{eff}} = 1$. აღნიშნულ დონეებზე დასახელებათა რიცხვი n_1 , n_2 და n_3 წონასწორობის შემთხვევაში განისაზღვრება ბოლცმანის კანონით

$$\begin{aligned}\frac{n_1}{n_2} &= e^{\frac{\hbar\omega_{12}}{kT}} \\ \frac{n_2}{n_3} &= e^{\frac{\hbar\omega_{23}}{kT}} \\ \frac{n_1}{n_3} &= e^{\frac{\hbar\omega_{13}}{kT}}\end{aligned}\quad (12.64)$$

სადაც

$$\hbar\omega_{12} = E_2 - E_1, \quad \hbar\omega_{23} = E_3 - E_2 \quad \text{და} \quad \hbar\omega_{13} = E_3 - E_1.$$

თუ აღნიშნულ დონეებზე რაიმე გზით შეეცვლით წონასწორობულ დასახელებათა რიცხვებს და შემდეგ გარეგან მიზეზს მოეხსნით, მაშინ სპინ-სისტემისა და მესერის ურთიერთქმედების შედეგად ისევ აღდგება ბოლცმანის წონასწორობის განაწილება. ამ შემთხვევაში სპინ-მესერის ქუთი-



ნახ. 139

ერთქმედებით გამოწვეული ალბათობები ზევით და ქვევით ზევით ერთმანეთის ტოლი არ არიან, როგორც ამას ადგილი აქვს გარეგანი ცვალებადი ქველის მოქმედების დროს. სპინ-მესერის ურთიერთქმედებით გამოწვეული გადასვლის ალბათობები მოცემულია შემდეგი ფორმულით:

$$W_{12} = W_{21} e^{-\frac{\hbar\omega_{12}}{kT}}, \quad W_{13} = W_{31} e^{-\frac{\hbar\omega_{13}}{kT}}, \quad W_{23} = W_{32} e^{-\frac{\hbar\omega_{23}}{kT}}, \quad (12.65)$$

დავუშვათ, რომ მოცემულ სპინ-სისტემაზე მოქმედებს გარეგანი ცვალებადი მაგნიტური ველი (დაქოქვის ველი) ω_{13} — სიხშირისა. ვინაიდან თავდაპირველად $n_1 > n_3$, გადასვლები E_1 დონიდან E_3 -ზე (შთანთქმა) მეტი იქნე-

ბა, ვიდრე შებრუნებული გადასვლები E_3 -დან E_1 -ზე (გამოსხივება), რის გამოც სპინსისტემა შთანთქავს ცვალებადი ველის წყაროდან ენერგიას. შთანთქმა შეწყდება მაშინ, როდესაც აღნიშნულ დონეებზე დასახლებათა რიცხვი ერთმანეთს გაუტოლდებიან ($n_1 \approx n_3$), ამ შემთხვევაში ამბობენ რომ მდგომარეობა გაჯერებულია.

დავუშვათ, რომ დაქოქვის ველის მოქმედებით მდგომარეობა გაჯერებულია, ამ დროს შესაძლებელია ორი მდგომარეობა: $n_3 > n_2$ ანდა $n_2 > n_1$. მაშასადამე, აღნიშნულ დონეებს ეთანადება უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობა.

ვთქვათ, $n_3 > n_2$. მაშინ, თუ სპინ-სისტემაზე ვიმოქმედებთ ω_{23} სიხშირის სიგნალით, მივიღებთ ამ უკანასკნელის გაძლიერებას. ასევე, თუ $n_2 > n_1$, მაშინ მივიღებთ ω_{12} სიგნალის გაძლიერებას, როდესაც სისტემაზე ვიმოქმედებთ ω_{12} სიგნალით.

უარყოფითი ტემპერატურის მიღების ეს მეთოდი პირველად წამოყენებულ იქნა ბრომბერგერის მიერ, რომელმაც საშუალება მოგვცა პრაქტიკულად განგვეზოციელებინა ელექტრომაგნიტური ტალღების გაძლიერება და გენერაცია უწყვეტი რეჟიმის პირობებში სიხშირის გარკვეულ დიაპაზონში. აღსანიშნავია ის გარემოება, რომ კვანტური გამძლიერებლების საკუთარი ხმაური ძალზე დაბალია, რამაც განაპირობა ასეთი გაძლიერებლების ფართო პრაქტიკული გამოყენებანი. პირველი სამდონიანი მაზერი განხორციელებულ იქნა 1957 წელს სკოვინის, ვეერისა და ზაიდელის მიერ.

ბ) ლაზერის მოქმედების პრინციპი

ლაზერის მოქმედების პრინციპი იგივეა, რაც მაზერისა. მაზერში გვაქვს გაძლიერება და გენერაცია ელექტრომაგნიტური ტალღებისა ზემაღალი სიხშირის არეში, ხოლო ლაზერის შემთხვევაში — ოპტიკური სიხშირის არეში. მაზერის შემთხვევაში დონეებს შორის გადასვლები მაგნიტოდიპოლურია, ხოლო ლაზერში — ელექტროდიპოლური. მაზერის შემთხვევაში მიღებულია მაღალი ტემპერატურის მიახლოება $\hbar\omega_{13} \ll kT_s$, ლაზერის შემთხვევაში ასეთი მიახლოება არ შეიძლება. გარდა ამისა, მაზერში გათვალისწინებულია მხოლოდ იძულებითი გადასვლები (გადასვლები გამოწვეული გარეგანი ცვალებადი ველით), ლაზერის შემთხვევაში საჭიროა აგრეთვე გათვალისწინება სპონტანური გადასვლებისა. ეს უკანასკნელი დაკავშირებულია იმასთან, რომ სპონტანური გადასვლის ალბათობა ოპტიკურ არეში ძალზე დიდია, ამიტომ მისი უგულებელყოფა შეუძლებელია. ოპტიკური დიაპაზონის შემთხვევაშიც, ისე როგორც მაზერებში, შესაძლებელია სამდონიანი სპინ-სისტემის განხილვა. პირველი სამდონიანი ლაზერი რუბინზე განხორციელებულ იქნა 1960 წელს მეიმანის მიერ.

გ) ნახევარგამტარული ლაზერის მოქმედების პრინციპი

უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობის განხორციელებისათვის საჭიროა ორი ამოცანის გადაწყვეტა:

1. აუცილებელია რაიმე გზით მივიღოთ ელექტრონების საკმარისად დიდი რაოდენობა გამტარებლობის ზონაში.

2, ელექტრონების განაწილება ენერგიის მიხედვით უნდა იყოს ისეთი, რომ მოცემული ენერგიის ინტერვალს გამტარებლობის ზონაში უნდა შესაბამებოდეს ელექტრონების მეტი რიცხვი, ვიდრე ვალენტურ ზონაშია ცხადია, ეს პირობა აუცილებელი არ არის დაცული იყოს ენერგიის ყველა მნიშვნელობისათვის. საკმარისია ეს პირობა, დაცული იყოს ენერგიისათვის, რომელიც ეთანადება გამტარებლობის ზონის ქვედა და ვალენტური ზონის ზედა ნაპირებს. ამ შემთხვევაში ნახევარგამტარი გვექნება უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობაში და მიიღება $\alpha = \frac{E_g}{h}$ სიხში-

რის სიგნალის გაძლიერება, სადაც E_g არის აკრძალული ზონის სიგანე, ვინაიდან ნახევარგამტარებისათვის $E_g = 1 \div 2 \text{ eV}$ სათანადო სიხშირე ხვდება ოპტიკურ არეში ($\omega \sim 10^{14} \div 10^{15} \text{ წმ}^{-1}$).

ნახევარგამტარებში უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობის განხორციელება შესაძლებელია მრავალი გზით: ელექტრული ველის მოქმედებით, ელექტრონების ბომბარდირებით და სხვა. აქ ჩვენ განვიხილავთ იმ მარტივ მეთოდს, რომელმაც ფართო პრაქტიკული გამოყენება პოვა ნახევარგამტარულ ლაზერებში. ეს მეთოდი წამოყენებულ იქნა 1961 წელს ბასოვის, პროხოროვისა და პოპოვის მიერ. ამ მეთოდის შინაარსი მდგომარეობს შემდეგში: განვიხილოთ $p-n$ გადასვლის ფენა. აღვნიშნოთ n -ით ელექტრონების ზოგადი რიცხვი, რომლებიც ეთანადებიან გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეც n არეში და p -თი ხვრელების რიცხვი, რომლებიც ეთანადებიან ვალენტური ზონის ზედა კიდეც p არეში, აღვნიშნოთ N_c და N_v -ით ეფექტურ მდგომარეობათა რიცხვი გამტარებლობის და ვალენტურ ზონებში სათანადოდ. თუ $p-n$ გადასვლაზე გამშვები მიმართულებით გავუტარებთ ძლიერ დენს, მაშინ გარკვეულ პირობებში შეიძლება მივიღოთ ისეთ მდგომარეობას, როდესაც p -არეში გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე გვექნება ელექტრონების მეტი რაოდენობა, ვიდრე n არის ვალენტურ ზონაში, ე. ი.

$$n > N_v - p$$

ელექტრონების ასეთ არაწონასწორულ განაწილებას უწოდებენ ინვექციას $p-n$ გადასვლაზე. ველის სწრაფად გამორთვის ღდას იწარმოება შემდეგი პროცესები: ა) p არეში ინვექტირებულ ელექტრონებს თავდაპირველად გააჩნიათ E_c -ზე მეტი ენერგიები, მაგრამ, საკმარისად მცირე τ_1

დროის განმავლობაში მესერთან დაჯახების შედეგად ისინი კარგავენ თავიანთი ენერგიის ნაწილს და ეშვებიან E_c დონეზე.

ბ) რალაც τ_2 დროის განმავლობაში დაიწყება E_c დონეზე მდებარე ელექტრონების რეკომბინაცია ვალენტური ზონის ხვრელებთან გამოსხივების სახით. ცხადია, თუ

$$\tau_1 \ll \tau_2,$$

მაშინ გარკვეული დროის განმავლობაში გვექნება უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობის განხორციელება აღნიშნულ E_c და E_v ენერგიის მდგომარეობის მიმართ. თუ რეკომბინაციის დაწყებამდე ვიმოქმედებთ

$\omega = \frac{E_g}{h}$ სიხშირის გარეგანი სიგნალით, მივიღებთ ამ უკანასკნელის გაძლიერებას.

პირველი ნახევარგამტარული ლაზერი შეიქმნა ამერიკის შეერთებულ შტატებში 1962 წელს, ხოლო 1963 წელს—საბჭოთა კავშირში CuA_s -ს მასალაზე. მონოკრისტალს CuA_s -ს ჰქონდა დაახლოებით კუბის ფორმა, როპლის წახნაგის სიგრძე $\sim 0,4$ მმ. კუბის ზედა წახნაგი იყო p ტიპის, ხოლო ქვედა წახნაგი — n ტიპის. ამ წახნაგების შუა ადგილზე მდებარეობდა $p-n$ გადასვლის არე. ორი გვერდითი წახნაგი, რომლებსაც ჰქონდათ ზუსტად ერთმანეთის პარალელური ორიენტაცია, გაშლიფული იყო მაქსიმალურად და ასრულებდნენ მოცულობითი რეზონატორის სარკეების როლს (ამ სარკეების არეკვლის კოეფიციენტი $\sim 30\%$). დანარჩენი ორი წახნაგი ერთმანეთის მიმართ ცოტათი დახრილი იყო იმ მიზნით, რომ თავიდან აეცილებინათ გენერაციის წარმოშობა წახნაგების პერპენდიკულარული მიმართულებით. უარყოფითი ტემპერატურის მდგომარეობის მისაღებად აღებულ ნიმუშში ატარებდნენ დენს მცირე იმპულსების სახით ($2-3$ მიკროსექუნდის განმავლობაში) დენის სიმკვრივე იყო 6500 ამპ/წმ, სარკეებად აღებული ზედაპირის პერპენდიკულარად მიღებული იქნა გამოსხივება $\lambda \simeq 8420 \text{ \AA}$ ტალღაზე. ნახევარგამტარული ლაზერის გამოსხივების ხაზის სიგანე მეტია, ვიდრე რუბინის ლაზერის გამოსხივების ხაზის სიგანე და შეადგენს $15 \text{ \AA}$. სწორედ ეს უკანასკნელი წარმოადგენს ერთ-ერთ ნაკლს ნახევარგამტარული ლაზერებისა რუბინის ლაზერთან შედარებით.

$p-n$ გადასვლაზე მიღებული ნახევარგამტარული ლაზერი შეიძლება შეშაობდეს როგორც იმპულსურ ისე უწყვეტ რეჟიმში, ნახევარგამტარული ლაზერების უპირატესობა მდგომარეობს იმაში, რომ მათი მარგი ქმედების კოეფიციენტი $\sim 100\%$. ე. ი. წყაროს ენერგია გადადის მთლიანად გამოსხივებაში. გარდა ამისა, ასეთი ლაზერების უპირატესობა მდგომარეობს იმაში, რომ ნახევარგამტარებში მინარევების კონცენტრაციისა

და მათი ბუნების ცვლილების გზით შეიძლება მივიღოთ გამოსხივება საკმარისად ფართო დიაპაზონში.

ობიექტურ არეში კვანტური გენერატორების — ლაზერების შესანიშნავი თვისებას წარმოადგენს გამოსხივების მაღალი მონოქრომატულობა, სხივების მცირე გაშლა, სივრცითი კოჰერენტულობა და მაღალი სიხშირე. ლაზერების ეს თვისებები განაპირობებენ მათ ფართო გამოყენებას ტექნიკისა და მეცნიერების სხვადასხვა სფეროებში. ლაზერების გამოყენებას ინფორმაციის გადაცემისათვის აქვს არსებითი უპირატესობა რადიოგამოსხივების გამოყენებასთან შედარებით. მართლაც, ლაზერული გამოსხივების სიხშირე 10^4 -ჯერ მეტია ყველაზე უფრო მცირე სიგრძის რადიოტალღებთან შედარებით, ამიტომ ამდენჯერვე იზრდება კავშირის არხების რიცხვი (მაგ. ტელეგადაცემის პროგრამა), რომელიც გადაეცემა თითოეულ ხაზზე. მცირე მოცულობაში ლაზერული გამოსხივების დიდი კონცენტრაციის ენერგიის შექმნის შესაძლებლობა საშუალებას გვაძლევს გამოვიყენოთ იგი ძნელად მცნობი სხეულების გასადნობად, მცირე ზომის ხერელების შემქმნელად, დეტალების შესადუღებლად, ქიმიური რეაქციის მიმდინარეობის დასაჩქარებლად და სხვა. ამჟამად ლაზერულ სხივებს მედიცინაში ხმარობენ მანევ სიმსივნეების ამოსაწვავად.

§ 16. მოცულობითი არამდგრადობა

ადვილი საჩვენებელია, რომ თუ სისტემა დენით შეიცავს უარყოფით დიფერენციალურ წინააღმდეგობას, მაშინ ასეთ სისტემაში შეტანილი მცირე შემფოთება დროის მიხედვით მუდამ მზარდი იქნება, ე. ი. სისტემა გადავა არამდგრად მდგომარეობაში. გამოთვლების გამარტივების მიზნით განვიხილოთ ნახევარგამტარი, რომელიც შეიცავს მხოლოდ ერთი ტიპის დენის მატარებლებს, მაგალითად ელექტრონებს და ვიგულისხმობთ, რომ ადვილი არა აქვს ელექტრონების დამატებით წარმოშობას ანდა რეკომბინაციას. დავწეროთ უწყვეტობის პირობა და პუასონის განტოლება

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0 \quad (12.66)$$

და

$$\operatorname{div} E = \frac{4\pi en}{x}, \quad (12.67)$$

სადაც x არის გარემოს დიელექტრიკული მუდმივა და

$$j = nv - D_e \nabla n = nu(E) E - D_e \nabla n$$

დავუშვათ, რომ სისტემაში მცირე შემფოთების შეტანის გამო n და E სიდიდეები შეიცვალა n' და E' -ით, ე. ი.

$$\begin{aligned} n &= n_0 + n' & n' &\ll n_0 \\ E &= E_0 + E' & E' &\ll E_0 \end{aligned} \quad \text{მასთან}$$

თუ n და E -ს ამ მნიშვნელობებს შევიტანთ χ -ს გამოსახულებაში და შე-
მოვისაზღვრებით მხოლოდ n' და E' პირველი ხარისხის წევრებით, მაშინ

$$j' = j - j_0 = n' v_d + \sigma_D E' - D_e \nabla n',$$

სადაც

$$v_d = u(E_0) E = u_0 E \quad \text{და} \quad \sigma_D = n_0 \frac{\partial v_a}{\partial E}.$$

თუ მხედველობაში მივიღებთ, რომ

$$\operatorname{div} E' = \frac{4\pi e n'}{\chi}$$

გვექნება

$$-\frac{\partial n'}{\partial t} + v_d \operatorname{grad} n' + \frac{4\pi e \sigma_D}{\chi} n' - D_e \Delta n = 0, \quad (12.68)$$

ამ განტოლების ამოხსნა ვეძიოთ შემდეგი სახით

$$n' \sim e^{i(kr - \omega t)}.$$

მაშინ n' -ის ამ მნიშვნელობის ჩასმა (12.63) ფორმულაში, გვაძლევს:

$$\omega = k v_d - i \left(k^2 D_e + \frac{4\pi e \sigma_D}{\chi} \right). \quad (12.69)$$

ამრიგად

$$n' \sim e^{i(kr - \omega_1 t)} \cdot e^{\omega_2 t},$$

სადაც

$$\omega_2 = - \left(k^2 D_e + \frac{4\pi e \sigma_D}{\chi} \right). \quad (12.70)$$

დაეუშვათ, რომ დიფუზიური წევრი $k^2 D_e < \frac{4\pi e \sigma_D}{\chi}$, მაშინ ω_2 -ის ნიშანი

დამოკიდებული იქნება σ_D -ს ნიშანზე. თუ $\sigma_D < 0$, ე. ი. სისტემაში გვაქვს
უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობა, მაშინ $\omega_2 > 0$, ე. ი. n'
(ასევე E') ღროის მიხედვით მუდამ მზარდი იქნება და ამრიგად, სისტე-
მაში წარმოიშობა მოცულობითი არამდგრადობა. დიფუზიური წევრი $k^2 D_e$

ამცირებს არამდგრადობის წარმოშობას. ცხადია, როდესაც $k^2 D_e > \frac{4\pi e \sigma_D}{\chi}$,

მაშინ $\omega_2 < 0$ ე. ი. სიმკვრივის ველის ფლუქტუაცია დიფუზიის შედეგად სწრა-
ფად (ექსპონენციალური კანონით), რელაქსირდება მოცულობაში, ამიტომ

არამდგრადობას ადგილი არ ექნება. როდესაც $k^2 D_e + \frac{4\pi e \sigma_D}{x} = 0$, მაშინ $\omega_e = 0$, ამიტომ მივიღებთ რხევას სიხშირით

$$\omega = kv_d. \quad (10.71)$$

სისტემაში უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობის წარმოშობა შეიძლება მოხდეს მრავალი ფიზიკური მექანიზმის გამო. მაგალითად, როდესაც დენის მატარებელთა კონცენტრაცია მცირდება ველის გადიდებათ (ეს შეიძლება მოხდეს ნიმუშში ჩამჭერი ცენტრების არსებობის გამო) და სხვა. თავის მხრივ ძვრადობის შემცირება შეიძლება გამოწვეული იქნეს მრავალი მიზეზით. მაგალითად: პიეზოელექტრულ ნახევარგამტარებში ძვრადობის შემცირება გამოწვეულია დენის მატარებელთა დამატებით დამუხრუჭების შედეგად ფონონებთან ინტენსიური ურთიერთქმედების გამო. ზოგიერთ ნახევარგამტარში გამტარებლობის ზონაში, გარდა ძირითადი მინიმუმისა, გვაქვს აგრეთვე სხვა მინიმუმები, რომლებსაც ეთანადებიან ელექტრონის უფრო დიდი ეფექტური მასა, ამიტომ ერთი ენერგეტიკული მინიმუმიდან მეორეზე ელექტრონების გადასვლის შემთხვევაში იცვლება ელექტრონის ეფექტური მასა და, მაშასადამე, მისი დრეიფული ძვრადობაც. შედეგად ამისა, ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელზე წარმოიშობა უარყოფითი წინააღმდეგობების უბანი. აღსანიშნავია ის გარემოება, რომ რა მექანიზმითაც არ უნდა იყოს წარმოშობილი სისტემაში უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობა, სისტემაში წარმოიშობა დომენები, ე. ი. მაღალი და დაბალი ველის დაძაბულობის უბნები, რომელთა პერიოდული განმეორება გვაძლევს დენის რხევებს.

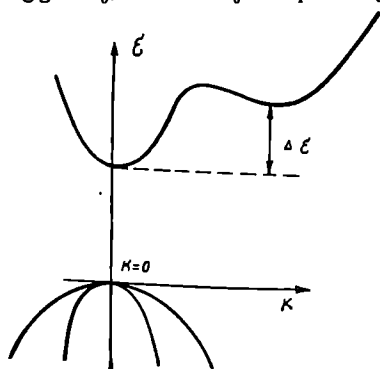
§ 17. განის გენერატორი

1963 წელს განმა საკმარისად ძლიერ ველში $C_{60}A_{18}$ -ის მასალაში შეამჩნია მაღალი სიხშირის რხევების გენერირება. ეს ეფექტი შემდეგში დამზერილ იქნა აგრეთვე სხვა ნახევარგამტარულ მასალებზე და ეწოდა განის ეფექტი. როგორც გამოირკვა, განის ეფექტი დაკავშირებულია აღნიშნულ ნახევარგამტარებში ზონური სურათის რთულ სტრუქტურასთან. ნახ. 140-ზე ნაჩვენებია $C_{60}A_{18}$ -ის ზონური სურათი.

$k = 0$ წერტილზე ვალენტური ზონის ზედა კიდეზე გვაქვს ორი ზონის ერთმანეთთან გადაფარვა, რომლებსაც ეთანადება ორი ტიპის ხვრელები—მძიმე და მსუბუქი. გამტარებლობის ზონის ქვედა კიდეზე გვაქვს ორი მინიმუმი, ერთი ეთანადება $k = 0$ და მეორე $k \neq 0$. ამ ორ მინიმუმს შორის მანძილი $\Delta E_1 = 0,36 \text{ eV}$.

პირველ მინიმუმს ეთანადება მსუბუქი ცივი ელექტრონები, რომელთა ეფექტური მასა $m_1^* = 0,072 m_0$ და ძვრადობა $u_1 = 5000 \text{ სმ}^2/\text{ვოლტ.წმ}$. მეორე მინიმუმს ეთანადება მძიმე—ცხელი ელექტრონები, რომელთა ეფექ-

ტური მასა $m_z^* = 1,2m$ და ძვრადობა $u_z = 100 \div 200$ სმ²/ვოლტ. წმ, ოთახის ტემპერატურაზე და შედარებით სუსტი ველის შემთხვევაში, თითქმის ყველა ელექტრონი იმყოფება ქვედა მინიმუმზე და აქვეთ მესერის ტემპერატურა T_0 , ამასთან $kT_0 < \Delta E_1$. მათი კონცენტრაცია აღენიშნოთ n_0 -ით.

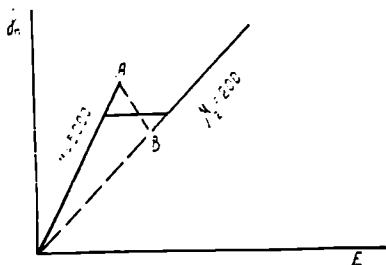


ნახ. 140

დენის სიმკვრივე ველის გადიდებით იზრდება $j_n = en_0 u_1 E$.

ამ დროს სითბური წონასწორობა ირრევეა, ელექტრონების სისტემა ხურდება და ველის ერთ გარკვეულ კრიტიკულ მნიშვნელობაზე, როდესაც $kT \geq \Delta E_1$, ელექტრონები გადადიან ქვედა ენერგეტიკული მინიმუმიდან ზედა ენერგეტიკულ მინიმუმზე. სხვანაირად რომ ვთქვათ, მსუბუქი—ცივი ელექტრონები გადადიან მძიმე—ცხელი ელექტრონების მდგომარეობაში, სადაც მათი

ძვრადობა მკვეთრად ეცემა, ამიტომ დენის სიმკვრივე მკვეთრად დაეცემა j_{max} -დან j_{min} -მდე, როგორც ეს წაჩვენებია ნახ. 141-ზე. ასეთი ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი ძალიან წააგავს გვირაბული დიოდების ვოლტ-ამპერულ მახასიათებელს (ნახ. 118). სადაც დენის დაცემის უბანი ძაბვის გადიდებით ხასიათდება უარყოფითი დიფერენციალური წინააღმდეგობით და წარმოადგენს რხევის გენერაციის წყაროს ($\frac{dy}{dv} < 0$).

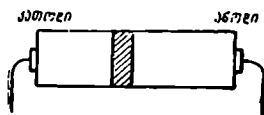


ნახ. 141

განის ეფექტის დეტალურმა განხილვამ გვიჩვენა, რომ განის ეფექტში ნიმუშის კონტაქტებზე არაერთი უარყოფითი წინააღმდეგობა არ მიიღება და, მაშასადამე, გენერაციის წარმოშობის მიზეზი სულ სხვაა. განის ეფექტი შეიძლება ავსხნათ, თუ დავეუშვებთ, რომ კრიტიკული ძაბვა E_k მიიღება ნიმუშის არა მთელ სიგრძეზე, არამედ მის რომელიმე ვიწრო უბანზე, რომელიც ნახ. 142-ზე ნაჩვენებია დაშტრიხული ზოლით.

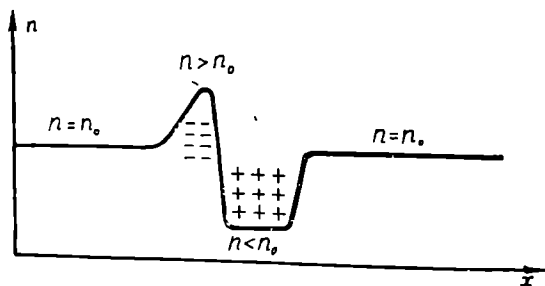
დავუშვათ, რომ ამ უბანზე გვაქვს რაღაც არაერთგვაროვნება, რომელიც ადიდებს ალებული უბნის ელექტრულ წინააღმდეგობას, მაშინ გარე-

განი ძაბვა არათანაბრად იქნება განაწილებული ნიმუშის მთელ სიგრძეზე; დაშტრიხულ უბანზე ველის დაძაბულობა უფრო მეტი იქნება, ვიდრე ნიმუშის დანარჩენ ნაწილებში, ამიტომ უპირველეს ყოვლისა, ამ უბანზე შეიქმნება კრიტიკული დაძაბულობა, რომელსაც მსუბუქი ელექტრონები გადაჰყავს მძიმე ცხელი—ელექტრონების მდგომარეობაში და ვინაიდან მათი ძვრადობის კოეფიციენტი მცირეა, კიდევ უფრო გაიზრდება ამ უბნის ელექტრული წინააღმდეგობა. შესაბამისად ამისა, გაიზრდება ველის დაძაბულობაც აღებულ უბანზე, სამაგიეროდ შემცირდება ველის დაძაბულობა ნიმუშის დანარჩენ ნაწილებში. რადგანაც ელექტრონების დრეიფის სიჩქარე პირდაპირპროპორციულია ძაბვისა, ამიტომ მძიმე ელექტრონების სიჩქარე თანდათანობით გაიზრდება, სამაგიეროდ შემცირდება მსუბუქი ელექტრონების სიჩქარე. ეს პროცესი იწარმოებს მანამ, სანამ არ დამყარდება დინამიკური წონასწორობა. დაშტრიხული უბნის მარჯვენა



ნახ. 142

და მარცხენა მხარეზე გვაქვს მსუბუქი ელექტრონები, რომელთა ძვრადობის კოეფიციენტი ბევრად აღემატება მძიმე ელექტრონების ძვრადობის კოეფიციენტს, ამიტომ დაშტრიხული უბნის მარცხენა მხარეზე მდებარე მსუბუქი ელექტრონები დაეწევიან მძიმე ელექტრონებს და აღმოჩნდებიან E_{hp} ველში, რის შედეგად ისინი გადადიან მძიმე ელექტრონების მდგომარეობაში. ამრიგად დაშტრიხულ უბანში ელექტრონების კონცენტრაცია $n > n_0$, რომელსაც შეესაბამება უარყოფითი მოცულობითი მუხტების



ნახ. 143

სიმკვრივე აღებულ უბანზე. მეორე მხრივ, დაშტრიხული უბნის მარჯვენა მხარეზე მყოფი მსუბუქი ელექტრონები გაასწრებენ მძიმე ელექტრონებს და ელექტრონებით გაღარიბების გამო დაშტრიხული უბნის მარჯვენა მხარეზე შეიქმნება დადებითი მუხტების მოცულობითი სიმკვრივე. მოცემულობით მუხტების ასეთ ფენას ეწოდება ელექტრული დომენი (ნახ. 143).

ამრიგად, როგორც კი ნიმუშის რომელიმე უბანზე ელექტრული ველი მიაღწევს თავის კრიტიკულ მნიშვნელობას, დაიწყება ამ უბანზე ელექტრული დომენის ფორმირება. დომენის შიგნით ელექტრული ველის დაძაბულობა თანდათანობით იწყებს ზრდას, სამაგიეროდ დომენის გარეთ ველის დაძაბულობა დაეცემა. შედეგად ამისა, დომენის შიგნით მძიმე ელექტრონების სიჩქარე გაიზრდება, ხოლო დომენის გარეთ მსუბუქი ელექტრონების სიჩქარე შემცირდება, დინამიკური წონასწორობის დამყარების დროს დომენის სიჩქარე განისაზღვრება შემდეგი პირობიდან

$$v_d = u_1 E_1 = u_2 E_2 \quad (12.70)$$

სადაც E_1 არის ველის დაძაბულობა დომენის გარეთ და E_D დომენის შიგნით, ცხადია დომენის სიჩქარე ნაკლებია ვიდრე ნიმუშში ელექტრონების სიჩქარე.

ელექტრული დომენის შექმნამდე ნიმუშში გვაქვს მხოლოდ მსუბუქი ელექტრონები, რომელთა ძვრადობა ძალზე დიდია, ამიტომ ველის გადიდებით დენის ძალა სწრაფად იზრდება და $t = t_1$ მომენტში, როდესაც ველი მიაღწევს ნიმუშის რომელიმე უბანზე კრიტიკულ მნიშვნელობას, დენის სიმკვრივე აღწევს მაქსიმუმს J_{max} . იქვე მყისვე დაიწყება დომენის შექმნა (დომენის შექმნის დრო ძალიან მცირეა), ამიტომ თითქმის ნახტომისებურად დენის სიმკვრივე დაეცემა J_{min} -მდე, რომელიც განისაზღვრება დომენის v_d სიჩქარით -

$$J_{min} = S j_{min} = e S n_0 v_d \quad (12.71)$$

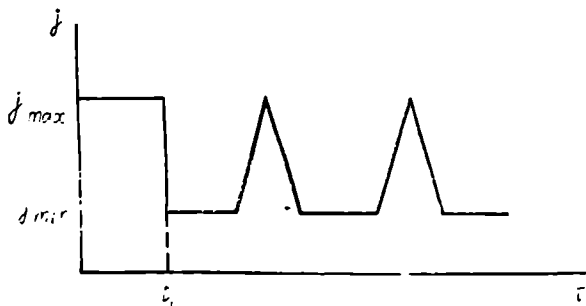
სადაც S არის ნიმუშის განკვეთის ფართობი.

დომენი v_d სიჩქარით მოძრაობს ანოდისაკენ და როდესაც იგი მიაღწევს ანოდს, დაინგრევა, ე. ი. ელექტრონები ისევ გადავლენ მსუბუქი ელექტრონების მდგომარეობაში, ამიტომ დენი ისევ სწრაფად გაიზრდება. როდესაც მიაღწევს J_{max} მნიშვნელობას, ნიმუშის რომელიმე სხვა წერტილზე ისევ დაეცემა J_{min} -მდე და ა. შ. ნახ. 144-ზე ნაჩვენებია დენის სიმკვრივის ცვლილების სათანადო სურათი. თუ აღვნიშნავთ I_0 -ით მანძილს დომენის გაჩენის წერტილიდან ანოდამდე, მაშინ დომენის სიციცხლის ხანგრძლივობა ანდა დენის სიხშირე მოიცემა შემდეგი ფორმულით

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{v_d}{l} \quad (12.72)$$

დომენის სიჩქარე არ არის დამოკიდებული გარეგანი ძაბვის სიდიდეზე, ეს უკანასკნელი გავლენას ახდენს მხოლოდ დომენის სისქეზე. დომენის სიჩქარე $v_d \approx 10^7$ სმ/წმ. თუ ავიღებთ $l = 50$ მკ-მ, მაშინ რხევის სიხშირე $\nu = 2$ მჰ დომენის სისქე $\sim 0,1 - 0,04\%$. დომენის წარმოშობის ბუნება ამჟამად საკმარისად კარგად არ არის შესწავლილი, შეიძლება ითქვას, რომ კრისტალში შესაძლებელია მხოლოდ ერთი დომენის წარმოშობა,

გამორიცხულია ერთდროულად რამდენიმე დომენის წარმოშობა. მართლაც, თუ ერთ-ერთ რომელიმე არაერთგვაროვნების უბანზე შეიქმნა კრიტიკული ველი. როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, ეს ველი განაგრძობს დომენის შიგნით ზრდას ნიმუშის დანარჩენ ნაწილებში ძაბვის შემცირების ხარჯზე, ამიტომ სანამ ეს დომენი არ გაქრება, სხვა არაერთგვაროვნების წერტილებში კრიტიკული ველი არ შეიქმნება. ახალი დომენი შეიძლება წარმოიშვას სხვა წერტილებში, რომლებიც სხვადასხვა მანძილებით არიან დაშორებული ანოდიდან, ამიტომ სათანადო სიცოცხლის ხანგრძლივობა ანდა სიხშირე შეიცვლება. ამ გარემოების შედეგად ჯერაც ვერ მოხერხდა



ნახ. 144.

ზუსტად განმეორებადი შედეგების მიღება, რაც მეტად აფერხებს განის ეფექტზე გენერატორების მასიურ დამზადებას. ამჟამად, პირობით გულისხმობენ, რომ დომენის წარმოშობა ხდება უშუალოდ კათოდიდან ამიტომ L -ში იგულისხმება ნიმუშის სიგრძე. საინტერესოა აგრეთვე შემდეგი გარემოება, თუ ნიმუშს დავამზადებთ ისე, რომ მისი განივი კვეთის ფართი თანდათანობით მცირდება კათოდიდან ანოდისაკენ, მაშინ რხევის სიხშირე შეიძლება ვარეგულიროთ გარეგანი ძაბვის შემწეობით. კვეთის შემცირებასთან ერთად ველის დაძაბულობა გაიზრდება კათოდიდან ანოდისაკენ და, მაშასადამე კრიტიკული ველის მდებარეობა შეიცვლება მიყენებული გარეგანი ძაბვის სიდიდის მიხედვით. შედარებით მცირე დაძაბულობაზე კრიტიკული ველი წარმოიშობა მინიმალური კვეთის ადგილზე, ე. ი. ანოდის მახლობლად, ამიტომ გენერირებული რხევის სიხშირე გაიზრდება. გარეგანი ძაბვის გადიდებით კრიტიკული ველის წარმოშობის ადგილი გადაინაცვლებს უფრო დიდი კვეთის ადგილზე, ე. ი. ანოდიდან უფრო მეტ მანძილზე, სათანადო რხევის სიხშირე შემცირდება.

თუ განის ეფექტის ახსნა ორი ქვეზონის საშუალებით შეესაბამება სინამდვილეს, მაშინ ჰიდროსტატიკურმა დაწოლამ უნდა მოგვცეს კრიტიკული ველის შემცირება, რადგანაც ჰიდროსტატიკური დაწოლა ამცირებს E_g -ს სი-

დიდეს. ცდა ამ გარემოებას ადასტურებს. გარდა ამისა, იმ ნახევარგამტარებში, სადაც აკრძალული ზონის სიგანე ნაკლებია, ვიდრე ქვეზონებს შორის მანძილი, აღგილი არ უნდა ჰქონდეს განის ეფექტს, რადგანაც სანამ მოხდებოდა ელექტრონების გადასვლა ქვედა ენერგეტიკული მინიმუმიდან ზედა ენერგეტიკულ დონეზე, მოხდებოდა ელექტრული გარღვევა. ექსპერიმენტები ამ დასკვნასაც ადასტურებს (იხილეთ ცხრილი 6).

ც ხ რ ი ლ ი 6

მასალა	აკრ. ზონა eV-ში	ქვეზონებს შორის მანძილი eV-ში	განის ეფექტი
300 შ	1,35	0,36	არის
•	1,25	0,4	არის
•	1,5	არაა ცნობილი	არის
•	1,36	1,1	არ არის
77	0,22	0,6	არ არის

განის ეფექტზე მაღალი სიხშირის გენერატორებს ამზადებენ C_{60} მასალაზე, რომლის პარამეტრები შემდეგია: კუთრი წინააღმდეგობა $\rho \approx 1 \div 10$ ომი. სმ ძვრადობა $\mu \sim 500$ სმ²/კ.წმ. და კონცენტრაცია $n = 10^{16} \div 10^{14}$ სმ⁻³, დიელექტრიკული რელაქსაციის დრო, რომელიც განსაზღვრავს დომენის შექმნის სიჩქარეს, შეადგენს 10^{-11} წმ.

ამჟამად, განის ეფექტზე უწყვეტ რეჟიმში მომუშავე გენერატორები სიმძლავრის მიხედვით კონკურენციას უწყევენ გვირაბულ დიოდებს, ხოლო იმპულსურ რეჟიმში ასეთი გენერატორების გამოსავალი სიმძლავრე ბევრად აღემატება სხვა პრინციპზე მომუშავე ნახევარგამტარული გენერატორებით მიღებულ სიმძლავრეს სიხშირის იმავე ინტერვალში. განის გენერატორის მ. კ. კ. აღწევს $2 \div 7\%$ -მდე, გამოსავალი სიმძლავრე 10^5 ვატი.

ს ა რ ლ ე ბ ი

შესავალი	3
თავი I. კრისტალების სტრუქტურა და მათი კლასიფიკაცია	5
§ 1. ამორფული და კრისტალური სხეულები	5
§ 2. კრისტალების სიმეტრია. სიმეტრიის ელემენტები	6
§ 3. კრისტალური მესერი. ბრავეს მესერი	9
§ 4. კრისტალური სისტემები	14
§ 5. შებრუნებული მესერი. მილერის ინდექსები	18
§ 6. რენტგენის სხივების დიფრაქცია კრისტალებში	22
§ 7. კრისტალში ნაწილაკთა ურთიერთქმედების ძალების დახასიათება	26
1. იონური კრისტალების ენერგია	28
მადელუნგის მუდმივის გამოთვლა იენის მეთოდით	32
2. ვალენტური კრისტალები	35
3. მოლეკულური კრისტალები	40
4. მეტალური კრისტალები	42
თავი II. მყარი სხეულის ატომების სითბური რხევები და სითბოტევადობის საკითხი	44
§ 1. მარტივი სხეულის ნაწილაკების სითბური რხევები და სითბოტევადობის კლასიკური თეორია	44
§ 2. აინშტაინის სითბოტევადობის თეორია	49
§ 3. ერთნაირი ატომებისაგან შემდგარი წრფივი მესერის რხევა	52
§ 4. ნორმალურ კოორდინატებზე გადასვლა	59
§ 5. მარტივი სამგანზომილებიანი კრისტალის სიხშირეთა სპექტრის გამოკვლევა დებაის მეთოდით	63
§ 6. მარტივი მყარი სხეულების სითბოტევადობა დებაის მიხედვით	67
§ 7. რთული მესერის ნორმალური რხევები	72
თავი III. თავისუფალი ელექტრონის თეორია მეტალებში	77
§ 1. თავისუფალი ელექტრონების ჰიპოთეზა. სითბოტევადობის კლასიკური თეორია	77
§ 2. თავისუფალი ელექტრონის კვანტური თეორია	80
§ 3. ელექტრონული გაზის სტატისტიკა	83
§ 4. ელექტრონული გაზის ენერგია და მდგომარეობის განტოლება	88
თავი IV. კრისტალური სხეულების ზონური თეორია	95
§ 1. მესერში ელექტრონის ტალღური ფუნქცია	96
§ 2. ეფექტური მასა. ეფექტური მასის მეთოდი	100
§ 3. კრონინგ-პენის ერთგანზომილებიანი ამოცანა	103
§ 4. თითქმის თავისუფალი ელექტრონის მიახლოება	110

§ 5. ბრილენის ზონების აგება ევალდის მეთოდით	115
§ 6. კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი ზონაში	119
§ 7. ძლიერი ბმის შემთხვევა (ბლოხის მეთოდი)	121
§ 8. მეტალები და არამეტალები	130
§ 9. ხერელები. ხერელური გამტარებლობა. ხერელების განაწილების ფუნქცია	133
§ 10. კვანტურ მდგომარეობათა სიმკვრივე ზონის კიდეების მახლობლად	136
§ 11. კრისტალში ელექტრონის ლოკალიზებული მდგომარეობა	138
თ ა ვ ი V. დეფექტები კრისტალებში	140
§ 1. ფრენკელისა და შოტკის ტიპის დეფექტები	141
§ 2. დიფუზიის მექანიზმი, იონური გამტარებლობა	144
§ 3. დისლოკაცია	147
თ ა ვ ი VI. ღენის მატარებელთა წონასწორული კონცენტრაცია ნახევარგამტარებში	161
§ 1. საკუთარი და მინარეველი გამტარებლობა	161
§ 2. n და p ტიპის ნახევარგამტარების მიღება	164
§ 3. იზოენერგეტიკული ზედაპირები და ზონური სურათი Ge და Si-თვის	169
§ 4. გამტარებლობის ელექტრონებისა და სავალენტო ხერელების კონცენტრაციის განსაზღვრა	175
§ 5. ელექტრონებისა და ხერელების განაწილება დონორებსა და აქცეპტორებზე	182
§ 6. ჰიმიური პოტენციალის დამოკიდებულება მინარევთა კონცენტრაცია-სა და ტემპერატურაზე	185
თ ა ვ ი VII. არაწონასწორული პროცესები	193
§ 1. ღენის მატარებელთა გენერაცია და რეკომბინაცია	193
§ 2. რეკომბინაცია ჩამჟერ ცენტრებზე. შოკლი-რიდის მექანიზმი	195
§ 3. რეკომბინაცია, რადენიმი ტიპის ჩამჟერი ცენტრების არსებობის შემთხვევაში	198
§ 4. ზედაპირული რეკომბინაცია	202
§ 5. ფერმის კვაზი-დონეები	203
§ 6. დიფუზიის განტოლება	204
თ ა ვ ი VIII. გადატანის მოვლენები	206
§ 1. ბოლცმანის განტოლება	206
— § 2. მეტალების ელექტრო და სითბოგამტარებლობის კოეფიციენტების გამოთვლა	213
§ 3. ელექტრონებისა და ხერელების ძვრადობა	216
§ 4. ხოლის ეფექტი	222
§ 5. რელაქსაციის დრო	230
§ 6. გამტარებლობის ელექტრონების (ხერელების) გაბნევა დამუხტულ და ნეიტრალურ მინარევებზე და სათანადო რელაქსაციის დროის გამოთვლა	235
§ 7. ელექტრონების (ხერელების) გაბნევა ატომურ კრისტალებში მესერის სითბურ რხევებზე	238
§ 8. გამტარებლობის ელექტრონების (ხერელების) რელაქსაციის დრო იონურ კრისტალებში	245
§ 9. აკრძალული ზონის სიგრძისა და მინარევთა ენერგეტიკული დონის განსაზღვრა კდით	250
თ ა ვ ი IX. ნახევარგამტარების ზოგიერთი ოპტიკური თვისება	253
§ 1. შთანთქმის კოეფიციენტი	253

§ 2. დასაშვები და აკრძალული პირდაპირი გადასვლები	255
§ 3. პირდაპირი და არაპირდაპირი გადასვლები $k_{min} \neq k_{max}$ შემთხვევაში	258
§ 4. ექსიტონი	260
• § 5. სხვა ტიპის გადასვლები.	263
ა) ზონის შიგნით გადასვლები	263
ბ) შთანთქმა თავისუფალ მატარებლებზე	264
გ) მესერული შთანთქმა	265
დ) შთანთქმა ცხელი ელექტრონების მონაწილეობით	265
§ 6. გამოსხივებადი გადასვლები. ვან რუსბრეკე-შოკლის თანაფარდობა	266
§ 7. იძულებითი გადასვლები	269
თ ა ე ი X. სხეულის ზოგიერთი მაგნიტური თვისება	271
§ 1. პარამაგნიტური, დიამაგნიტური და ფერომაგნიტური სხეულები	271
§ 2. პარამაგნეტიზმის კლასიკური და კვანტური თეორიები	273
§ 3. ელექტრონული გაზის პარამაგნეტიზმი	280
§ 4. დიამაგნეტიზმის კლასიკური და კვანტური თეორიები	283
§ 5. თავისუფალი ელექტრონების ორბიტალური დიამაგნეტიზმი (ლანდაუს დიამაგნეტიზმი)	286
§ 6. ფერომაგნეტიზმი (ვეისის თეორია)	288
§ 7. ფერომაგნიტური დომენები	292
§ 8. მაგნიტური რეზონანსის პრინციპი	295
§ 9. სპინ-მესერული და სპინ-სპინური რელაქსაციის დრო	300
თ ა ე ი XI. კონტაქტური მოვლენები	304
§ 1. მეტალის კონტაქტი ნახევარგამტართან	304
§ 2. დენის გასწორება მეტალ-ნახევარგამტარის კონტაქტზე	313
ა) თხელი კონტაქტური ფენის შემთხვევა (დიოდური თეორია)	317
ბ) სქელი კონტაქტური ფენის შემთხვევა (დიფუზიური თეორია)	318
§ 3. დენის გასწორება $p-n$ გადასვლაზე	323
ა) თხელი $p-n$ გადასვლის ფენის ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი	330
ბ) ვოლტ-ამპერული მახასიათებელი $p-n$ გადასვლის ფენაში რეკომბინაციის გათვალისწინების შემთხვევაში	334
§ 4. მუხტური და დიფუზიური ტევადობა	336
თ ა ე ი XII. ნახევარგამტარული ხელსაწყოები	339
§ 1. წერტილოვანი და ბრტყელი დიოდები	339
§ 2. ზეაქური გარღვევის დიოდები	344
§ 3. გვირაბული დიოდები	347
§ 4. პარამეტრული დიოდები	351
§ 5. $p-n-p$ ტრანზისტორი	356
§ 6. ტრანზისტორის ძირითადი პარამეტრები	364
§ 7. სხვა ტიპის ტრანზისტორები	368
§ 8. ელვის ტრანზისტორი	370
§ 9. ოპტოელექტრონული ხელსაწყოები	372
§ 10. ფოტოელემენტის ფოტოელექტრომამოძრავებელი ძალის გამოთვლა ფოტოელემენტის მარგი ქმედების კოეფიციენტი	376
§ 11. რადიოქტიური გამოსხივების გარდაქმნა ელექტრულ ენერგიადა	377
§ 12. ფოტოვოლტური ეფექტის მიღების სხვადასხვა საშუალებანი	379
§ 13. მოცულობითი ფოტოვოლტური ეფექტი (დეუმბერის ეფექტი)	380
	382

§ 14. პეტეროგადასელები:	385
ა) დიოდური სტრუქტურა პეტეროგადასელებზე	386
ბ) ტრანზისტორული სტრუქტურა პეტეროგადასელებზე	388
გ) გამოსხივების წყარო	389
§ 15. კვანტური გამაძლიერებლები და გენერატორები	390
ა) მაზერის მოქმედების პრინციპი	392
ბ) ლაზერის მოქმედების პრინციპი	394
გ) ნახევარგამტარული ლაზერის მოქმედების პრინციპი	395
§ 16. მოცულობითი არამდგრადობა	397
§ 17. განის გენერატორი	399

Мирцхулава Иван Андреевич

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

(на грузинском языке)

Издательство Тбилисского университета

Тбилиси 1979

გამომცემლობის რედაქტორი ა. ს ტ უ რ უ ა
ტექნიკური რედაქტორი ი. ხ უ ც ი შ ვ ი ლ ი
კორექტორი მ. ვ ა ჩ ე ი შ ვ ი ლ ი
სბ 274

გადაეცა წარმოებას 17. 05. 78. ხელმოწერილია დასაბეჭდად 22. 02. 79.
უე 05532. საბეჭდი ქაღალდი 60×90. პირობითი ნაბეჭდი თაბახი 26,55.
სააღრ.-საგამომც. თაბახი 23,27.
ტირაჟი 1000. შეკვეთა 798.

ფასი 1 მან. 12 კაპ.

თბილისის უნივერსიტეტის გამომცემლობა,
თბილისი, 380028, ი. ჯავახიშვილის პროსპექტი, 14.
Издательство Тбилисского университета,
Тбилиси, 380028, пр. И. Чавчавадзе, 14.

თბილისის უნივერსიტეტის სტამბა,
თბილისი, 380028, ი. ჯავახიშვილის პროსპექტი, 1.
Типография Тбилисского университета,
Тбилиси, 380028, пр. И. Чавчавадзе, 1.

პა.	სტრუქტონი		არის	უნდა იყოს
	ზემოდან	ქვემოდან		
12	12		$n = \frac{\varphi_n}{2\pi}$	$n = \frac{2\pi}{\varphi_n}$
22		2	(100), (001), (010), (001)	(001), ($\bar{1}00$) ($0\bar{1}0$), (00 $\bar{1}$)
36		11	r_{a2} და r_{b1}	r_{b1} და r_{a2}
39		2	$A = \int \psi_a^0(1) \psi_b^0(1) V(1,2) \times$ $\times \psi_a^0(2) \psi_b^0(2) dr_1 dr_2$	$A = \int \psi_a^0(1) \psi_b^0(2) V(1,2) \times$ $\times \psi_a^0(2) \psi_b^0(1) dr_1 dr_2$
39		7	$\psi_a^{02}(2) \psi_b^{02}(2)$	$\psi_a^{02}(1) \psi_b^{02}(2)$
59		10	$\psi_a^0(1) \psi_b^0(1)$ $\psi_a^0(2) \psi_b^0(2)$	$\psi_a^0(1) \psi_b^0(2)$ $\psi_a^0(2) \psi_b^0(1)$
88	7		$E = E_{max}$	$E < E_{max}$
88	6		$E < E_{max}$	$E > E_{max}$
91	1		$KT/\mu \sim \frac{1}{40} eV$	$KT \sim \frac{1}{40} eV$
101		6	m_{in} არის ეფექტური მა- სის ტენზორის (ik) კომპონენტები	$\frac{1}{m_{in}}$ არის შებრუნებუ- ლი ეფექტური მასის (in) კომპონენტი
132	15		კენტია.	ლუწია
161	7—8		აკრძალული ზონა	გამტარებლობის ზონა
224	8		ველის ნამდვილისა	ველის ნამრავლისა
237	4		ბორნის მთხასლეობაში	ბორნის მიახლოებაში
261		7	ტომები	ატომები
290		4	$I = I_0 \left(L \frac{\gamma \mu I}{KT} \right)$	$I = I_0 L \left(\frac{\gamma \mu I}{KT} \right)$
290	14	11	$I = L(x)$	$y = L(x)$
298	9		$x = x' - tx''$	$x = x' - ix''$
316	12		კონკურენცია	კონცენტრაცია
388		15	გამოსახულება	გამოსხივება
404	I და II სვეტი ცხრილი 6		მასალა	აკრ. ზონა eV-ში
			300 I " 1,5 " 1,36 77	1,35 1,25 1,5 0,22
			მასალა	აკრ. ზონა eV-ში
			GaAs 300°K InP —" — CdTe —" — InAs —" — InSb 77°K	1 35 1,25 1,5 0,36 0,22