

ლევან გლურჯიძე, აკაკი გიგინეიშვილი

ნახევრად გამტარების ფიზიკა

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი
2018

შესავალი

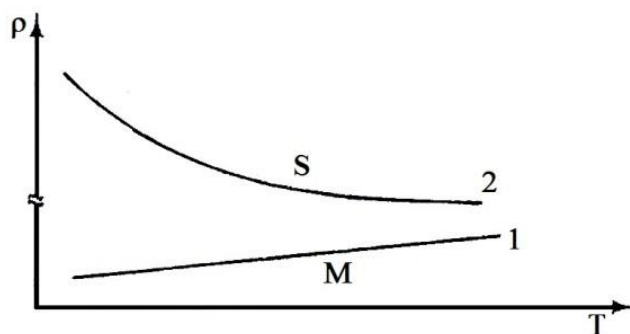
ნახევრად გამტარი. ნახევრად გამტარი მასალები

მყარი სხეულები ელექტროგამტარობის მიხედვით იყოფა სამ ძირითად კლასად: ლითონები $\sigma = j/\varepsilon = 10^4 - 10^6$ ომი⁻¹სმ⁻¹ (σ - ელექტროგამტარობა; j - დენის სიმკვრივე; ε - ელექტრული ველის დაძაბულობა). დიელექტრიკები $\sigma < 10^{-10}$ ომი⁻¹სმ⁻¹, ნახევრად გამტარები $\sigma = 10^{-10} - 10^4$ ომი⁻¹სმ⁻¹ (ყველა რიცხვითი მნიშვნელობა $T = 300K$ ტემპერატურას შეესაბამება). როგორც ვხედავთ, ნახევრად გამტართა σ ფართო ინტერვალში იცვლება. მაგრამ გაცილებით მნიშვნელოვანია ის თვისობრივი განსხვავება, რომელიც გამოყოფს ნახევრად გამტარს ლითონისა და დიელექტრიკისაგან. ეს არის ნახევრად გამტარის მაღალი მგრძობიარობა გარეშე პირობების (ზემოქმედების) მიმართ (ტემპერატურა, წნევა, განათებულობა, დასხივება და ა.შ.), მისი შინაგანი აგებულების სრულყოფილობის მიმართ (კრისტალური მესრის საკუთარი დეფექტები, მინარევები და სხვა). მაგალითად, თუ ლითონის კუთრი წინაღობა ($\rho = 1/\sigma$) წორფივად იზრდება ტემპერატურის მომატებისას

$$\rho_m = \rho_{0m} \cdot \alpha \cdot T \quad (1)$$

ნახევრად გამტარში ადგილი აქვს ელექტროწინაღობის სწრაფ, ექსპონენციალური კანონის (იხ. ნახ) შესაბამის შემცირებას

$$\rho_s = \rho_{0s} e^{b/T_0} \quad (2)$$



კუთრი წინაღობის ტემპერატურული დამოკიდებულება
(1 - ლითონი; 2 - ნახევრად გამტარი)

აქ a წინაღობის ტემპერატურული კოეფიციენტი, ρ_s, ρ_{0s} და b - მუდმივებია, რომლებიც კონკრეტულ ნივთიერებას ახასიათებენ ტემპერატურათა გარკვეულ ინტერვალში ($b > 0$). ფორმულა (2) ასეც შეიძლება გადავწეროთ:

$$\sigma_s = \sigma_{0s} e^{-b/T} = \sigma_{0s} e^{E_0/k_0T}. \quad (3)$$

E_0 ნახევრად გამტარის აქტივაციის ენერგიას უწოდებენ (k_0 - ბოლცმანის მუდმივა). დაბალ ტემპერატურებზე, როდესაც $k_0T \ll E_0$ ნახევრად გამტარის ელექტროგამტარობა იმდენად მცირეა, რომ ნახევრად გამტარი პრაქტიკულად დიელექტრიკი ხდება. გამტარობის გასაზრდელად ნახევრად გამტარს უნდა გადავცეთ ენერგია, რომლის კრიტიკულ მნიშვნელობას განსაზღვრავს სწორედ აქტივაციის ენერგია. გადაცემული ენერგია მიდის მუხტის თავისუფალი გადამტანების კონცენტრაციის (თავისუფალი მუხტების რაოდენობა კრისტალის მოცულობის ერთეულში) გაზრდაზე. დიელექტრიკში ელექტრონის გამონ-თავისუფლებას ძალიან დიდი ენერგია სჭირდება, ამიტომ დიელექტრიკში თავისუფალი ელექტრონები არ არის. ლითონებში, პირიქით, ნებისმიერ ტემპერატურაზე თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაცია ძალიან მაღალი და პრაქტიკულად უცვლელია. მხოლოდ ნახევრად გამტარები ქმნიან ნივთიერებათა იმ კლასს, რომლისთვისაც დამახასიათებელია მუხტის თავისუფალი გადამტანების რიცხვის ფართო ინტერვალში ცვლილება ენერგიის შთანთქმით ან გამოსხივებით. სწორედეს არის ის ბაზისი, რომელიც საშუალებას იძლევა შედარებით მარტივად ვცვალოთ ნახევრად გამტარის ფიზიკური პარამეტრები და ამდენად, შევქმნათ მათ საფუძველზე სხვადასხვა დანიშნულების ხელსაწყოები: დიოდები და ტრანზისტორები, ფოტო და თერმოელემენტები, შუქდიოდები და ლაზერები, ტენზო და ჰოლის გადამწოდები და კიდევ მრავალი სხვა.

ნახევრად გამტართა კლასს მიეკუთვნებიან ასობით ერთმანეთისაგან სრულებით განსხვავებული ნივთიერებები – როგორც ელემენტები (გერანიუმი, სილიციუმი), ასევე ქიმიური შენაერთები (არაორგანული და ორგანული, კრისტალური და ამორფული, მყარი და თხევადი, არამაგნიტური და მაგნიტური). დღეისათვის ელექტრული ხელსაწყოების დასამზადებლად ძირითადად იყენებენ არაორგანულ მყარ კრისტალურ ნივთიერებებს. გერმანიუმის და სილიციუმის მონოკრისტალების გარდა, სულ უფრო ფართოდ ინერგება ტექნიკაში სხვადასხვა შენაერთები, რომელთა შორის შეიძლება გამოვყოთ $A^{III}B^V$ (მენდელეევის სისტემის III და V ჯგუფის ელემენტების საფუძველზე შექმნილი შენაერთები, მაგალითად GaAs, InSb და ა.შ.), $A^{IV}B^{VI}$ (PbS, PbSe), $A^{II}B^{VI}$ (CdS, HgTe) ტიპის შენაერთები, მათი მყარი ხსნარები ($Al_{1-x}Gd_xSb$) და კიდევ მრავალი სხვა.

თავი I

მუხტის გადატანების ენერგეტიკული სექტორი იდეალურ ნახევრად გამტარში

1.1. ელექტრონები იდეალურ კრისტალში.

შრედინგერის განტოლება.

განვიხილოთ ელექტრონების მოძრაობა იდეალურ უსასრულო კრისტალში. იდეალური ეწოდება კრისტალს, რომლის კრისტალური მესერი მკაცრად პერიოდულია, ე.ი. იონები არ არიან წანაცვლებული წონასწორობის მდებარეობის მიმართ, ყველა კვანძში მოთავსებულია ერთი ტიპის იონები და არ შეიცავს სხვა სახის ატომებს.

კრისტალში მუხტის გადატანების მოძრაობა ემორჩილება კვანტური ფიზიკის კანონებს, ე.ი. ელექტრონის მოძრაობა უნდა განვიხილოთ ჰაიზენბერგის განუზღვრელობის პრინციპიდან გამომდინარე, რაც იმაში მდგომარეობს, რომ ელექტრონის კოორდინატი და იმპულსი ერთდროულად შეიძლება განსაზღვროთ მხოლოდ პლანკის მუდმივის სიზუსტით $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$, აქედან გამომდინარე, კვანტურ მექანიკაში მიღებულია ელექტრონის სტატისტიკური წარმოდგენა და მისი მოძრაობა განიხილება ამა თუ იმ მდგომარეობაში ნაწილაკის მოხვედრის ალბათობის მეშვეობით. გარკვეულ მდგომარეობაში ელექტრონის მოხვედრის ალბათობას განსაზღვრავს ტალღური ფუნქცია. თუ ელექტრონის მოძრაობას წარმოვიდგენთ ტალღის სახით, მაშინ ამ ტალღის ამპლიტუდის კვადრატი (რომელიც ახასიათებს მის ინტენსივობას მოცემულ წერტილში) გვიჩვენებს დროის t მომენტისათვის r წერტილის შემცველ მცირე მოცულობაში ელექტრონის მოხვედრის ალბათობის სიმკვრივეს

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}, t), \quad (1.1)$$

სადაც $\Psi^*(\vec{r}, t)$ არის $\Psi(\vec{r}, t)$ ფუნქციის კომპლექსურად შეუღლებული ფუნქცია, რომლის შერჩევა ხდება ნორმირების პირობის გათვალისწინებით

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d\vec{r} = 1. \quad (1.2)$$

ტალღური ფუნქციის საპოვნელად გამოიყენება შრედინგერის განტოლება

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t). \quad (1.3)$$

\hat{H} – არის სისტემის სრული ენერგიის ოპერატორი (ჰამილტონიანი), რომელიც თავისუფალ სივრცეში მოძრავი ელექტრონისათვის შეიძლება გამოვსახოთ კინეტიკური ენერგიის ოპერატორისა \hat{T} და პოტენციური ენერგიის ოპერატორის \hat{U} ჯამის სახით:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}. \quad (1.4)$$

კვანტურ ფიზიკაში ფართოდ გამოიყენება ოპერატორის ცნება. ზოგადად, ოპერატორი \hat{L} წარმოადგენს იმ მოქმედებათა სიმბოლურ აღნიშვნას, რომლებიც უნდა ჩავატაროთ φ_1 ფუნქციაზე, რომ მივიღოთ φ_2

$$\hat{L}\varphi_1 = \varphi_2 \quad (1.5)$$

ძირითადად ჩვენ საქმე გვექნება ე.წ. წრფივ და ერმიტულ ოპერატორებთან, ანუ ისეთ ოპერატორებთან, რომლებიც შესაბამისად აკმაყოფილებენ პირობებს

$$\{\hat{L}(a\varphi_1 + b\varphi_2) = a\hat{L}\varphi_1 + b\hat{L}\varphi_2; \int \varphi_1^* \hat{L}\varphi_2 dx = \varphi_2^* \hat{L}\varphi_1 dx\}, \quad (1.6)$$

სადაც \hat{L}^* - \hat{L} ოპერატორის კომპლექსურად შეუღლებული ოპერატორია. შეიძლება შეირჩეს ისეთი ფუნქციები, რომლებზედაც \hat{L} ოპერატორის მოქმედება გამოიხატება ამ ფუნქციის რაღაც მუდმივაზე ნამრავლით

$$\hat{L}\varphi = i\varphi \quad (1.7)$$

მაშინ φ ფუნქციას ეწოდება \hat{L} ოპერატორის საკუთარი ფუნქცია, ხოლო i მუდმივას - \hat{L} ოპერატორის საკუთარი მნიშვნელობა. მდგომარეობას, რომლის შესაბამის თითოეულ საკუთარ ფუნქციას ერთი საკუთარი მნიშვნელობა შეესაბამება, გადაუგვარებელი მდგომარეობა ეწოდება. ხოლო, თუ რომელიმე საკუთარ მნიშვნელობას შეესაბამება m რაოდენობის საკუთარი ფუნქცია, მაშინ ასეთ მდგომარეობას m -ჯერ გადაგვარებული მდგომარეობა ეწოდება.

თუ შრედინგერის განტოლებაში (1.3) სისტემის პოტენციური ენერგია დროზე არ არის დამოკიდებული, მაშინ ტალღური ფუნქცია შეიძლება წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0(\vec{r})f(t). \quad (1.8)$$

ჩავსვათ (1.8) გამოსახულება (1.3)-ში

$$i\hbar\Psi_0(\vec{r})\frac{\partial f(t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi_0(\vec{r})f(t), \quad (1.9)$$

თუ გავაცალკევებთ ცვლადებს

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t} = \frac{1}{\Psi_0(\vec{r})}\hat{H}\Psi_0(\vec{r}) = E, \quad (1.10)$$

რადგანაც (1.10) გამოსახულების მარცხენა ნაწილი დამოკიდებულია მხოლოდ t დროზე, ხოლო მარჯვენა ნაწილი - მხოლოდ \vec{r} კოორდინატზე, ამიტომ მარჯვენა ნაწილი წარმოვადგინოთ (1.11) ფორმით

$$\hat{H}\Psi_0(\vec{r}) = E\Psi_0(\vec{r}). \quad (1.11)$$

(1.7) და (1.11) გამოსახულებების შედარებით E წარმოადგენს \hat{H} ჰამილტონიანის საკუთარ მნიშვნელობას (სისტემის სრულ ენერგიას), ხოლო $\Psi_0(\vec{r})$ - ამ ოპერატორის საკუთარ ფუნქციას. (1.11) გამოსახულებას ეწოდება შრედინგერის სტაციონალური განტოლება. E -ს ყველა შესაძლო მნიშვნელობის ერთობლიობა ნაწილაკების სისტემის ენერგეტიკულ სპექტრს ქმნის.

1.2. ენერგეტიკული სპექტრის ზონური ხასიათი

ნახევრად გამტარ კრისტალში მიმდინარე ფიზიკური მოვლენების უმრავლესობა მუხტის გადამტანების ენერგეტიკული სპექტრით განისაზღვრება. ენერგეტიკული სპექტრის დასადგენად, როგორც წინა პარაგრაფში ვაჩვენეთ, საჭიროა კრისტალის შემადგენელ ნაწილაკთა სისტემისათვის შრედინგერის განტოლების ჩაწერა, ამოსხნა და მისი ანალიზი. ვიდრე გადავიდოდეთ ამოცანის რაოდენობრივ შესწავლაზე, ხარისხობრივად განვიხილოთ ამ სპექტრის ხასიათი, იზოლირებულ ატომში ენერგეტიკულ დონეთა განლაგების სურათიდან გამომდინარე.

იზოლირებულ ატომში საქმე გვაქვს ენერგეტიკულ დონეთა დისკრეტულ სისტემასთან. ენერგეტიკული სპექტრის დისკრეტულობა ატომში ელექტრონებისათვის დისკრეტული ორბიტების არსებობასთან არის დაკავშირებული. ორბიტების განლაგება და ამდენად, ელექტრონების ენერჯიაც, განისაზღვრება ატომის შემადგენელ ნაწილაკთა ურთიერთქმედებით. ცხადია, რომ ერთი და იგივე ნივთიერების ატომების სპექტრები იდენტურია. N რაოდენობის იდენტური ატომებიდან კრისტალური მესრის ჩამოყალიბებისას, თავდაპირველად, სანამ მანძილი ატომებს შორის ჯერ კიდევ საკმარისად დიდია, თითოეული ატომური დონე ინარჩუნებს თავის ენერჯიას (თითოეული დონე N -ჯერ გადაგვარებულია). მაგრამ ატომებს შორის მანძილის შემცირება ართულებს და ზრდის ურთიერთქმედებას ატომის შემადგენელ ნაწილაკებს შორის, ესკი თითოეული დონის N ენერგეტიკულ დონეთა სისტემად გახლეჩას განაპირობებს. მაშასადამე, თითოეული N -ჯერ გადაგვარებული დონის მაგივრად გაჩნდება ენერგეტიკული ზონა, რომელიც შეიცავს N რაოდენობის მჭიდროდ განლაგებულ დონეებს, ე.ი. მუხტის გადამტანების ენერგეტიკულ სპექტრს კრისტალში ზონური ხასიათი გააჩნია. ენერგეტიკული ზონების გაჩენა ატომების მიახლოებისას მეზობელი ატომების ელექტრონული გარსების შეხებას, გადაფარვას გამოხატავს. მაშასადამე, გარე გარსების ელექტრონებს საშუალება ექნებათ, ენერჯიის შეუცვლელად, გადავიდნენ ერთი ატომიდან მეორეზე. ასეთი ელექტრონები აღარ ეკუთვნიან ერთ რომელიმე ატომს, არამედ მესრის შემადგენელი ატომების საერთო საკუთრებაა.

ენერგეტიკული ზონის სიგანე, ელექტრონების ურთიერთქმედების სიდიდე დამოკიდებულია ელექტრონის ბირთვთან ბმის ხარისხზე. რაც უფრო ძლიერია ბმა, რაც უფრო ღრმა გარსებს ვიხილავთ, მით უფრო ვიწრო იქნება ზონის სიგანე. ისევე, როგორც იზოლირებულ ატომში გვხვდება ელექტრონებით დაუკავებელი, ნაწილობრივ და მთლიანად შევსებული გარსები, ასევე კრისტალში სხვადასხვა იქნება

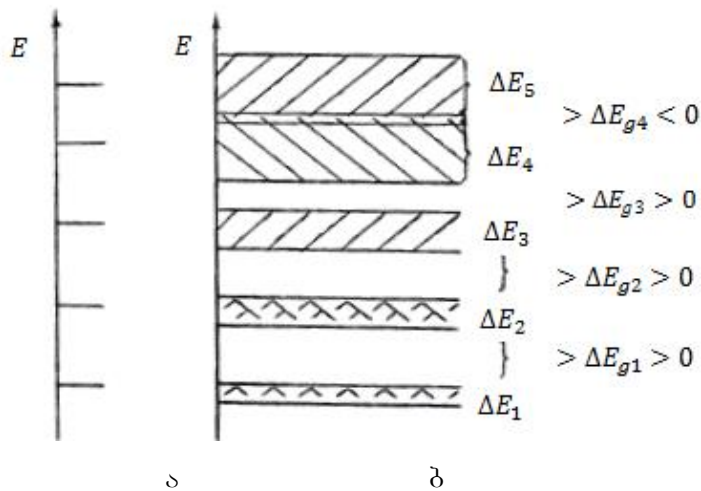
ენერგეტიკული ზონების შევსებაც. ქვედა შევსებულ ზონებთან ერთად სპექტრში გვექნება უფრო განიერი თავისუფალი ზონებიც.

დაშვებული (შევსებული და თავისუფალი) ზონები გამოსახავენ ელექტრონის შესაძლო ენერჯიათა მნიშვნელობას, მათი გამყოფი ენერგეტიკული ინტერვალები – აკრძალული ზონები – ენერჯიათა იმ მნიშვნელობებს აერთიანებენ, რომელთა მატარებელი ელექტრონი კრისტალში არ გვხვდება. ენერჯიის ზრდისას დაშვებული ზონების სიგანე (ΔE) იზრდება, ხოლო აკრძალულის (ΔE_g) – მცირდება. ზოგიერთ შემთხვევაში მეზობელი დაშვებული ზონების სიგანე იმდენად დიდია, რომ ადგილი აქვს მათ გადაფარვას ($\Delta E_g < 0$).

ნახევრად გამტარის ერთ-ერთ ძირითად მახასიათებელ პარამეტრს წარმოადგენს იმ აკრძალული ზონის სიგანე, რომელიც გამოყოფს ერთმანეთისაგან ენერჯიის მიხედვით უმაღლეს შევსებულ (სავალენტო) და უდაბლეს თავისუფალ (გამტარობის) ზონებს, ე.ი.

$$\Delta E_g = E_c - E_v, \tag{1.12}$$

სადაც E_c და E_v შესაბამისად, გამტარობის ზონის მინიმალური და სავალენტო ზონის მაქსიმალური ენერჯიებია.



ნახ. 1.1. იზოლირებულ ატომში ენერგეტიკულ დონეთა (ა) და კრისტალში ენერგეტიკული ზონების (ბ) დისკრეტულ სიმრავლეთა სქემები 1,2 - ელექტრონებით შევსებული ზონები; 3,4,5, - თავისუფალი ზონები)

1.3. ადიაბატური და ერთელექტრონიანი მიახლოება

იმისათვის, რომ შევისწავლოთ სავალენტო და გამტარობის ზონების ენერგეტიკული სპექტრი, გავაანალიზოთ შრედინგერის განტოლება

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \tag{1.13}$$

კრისტალის შემადგენელი ნაწილაკების სისტემისათვის \hat{H} ჰამილტონიანი შეიძლება წარმოვადგინოთ ხუთი შესაკრების წყაბით:

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{U}_e + \hat{U}_n + \hat{U}_{en} \quad (1.14)$$

სადაც $\hat{T}_e = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i$ და $\hat{T}_n = \sum_l -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_l$ – ელექტრონებისა და ბირთვების კინეტიკური ენერგიების ოპერატორებია;

$$\hat{U}_e = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad \text{და} \quad \hat{U}_n = \frac{1}{2} \sum_{l \neq k} \frac{Z_l Z_k e^2}{\epsilon |\vec{R}_l - \vec{R}_k|} \quad - \quad \text{ელექტრონებისა და ბირთვების}$$

პოტენციური ენერგიების ოპერატორები; $\hat{U}_{en} = -\sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{R}_l|}$ ელექტრონების ბირთვებთან ურთიერთქმედების პოტენციური ენერგიის ოპერატორი; E -სისტემის სრული ენერგია. მაშინ (1.13)-ში (1.14)-ის გათვალისწინებით სისტემის შრედინგერის განტოლება მიიღებს სახეს:

$$\left\{ \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \sum_l -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_l + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq k} \frac{Z_l Z_k e^2}{\epsilon |\vec{R}_l - \vec{R}_k|} - \sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{R}_l|} \right\} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N) = E \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N), \quad (1.15)$$

ცხადი სახით ტალღური ფუნქციის ამოხსნა (1.15) ფორმულიდან შეუძლებელია, რადგანაც განტოლება შეიცავს ცვლადების ძალიან დიდ რიცხვს. კერძოდ, დამოუკიდებელ ცვლადთა რიცხვი განისაზღვრება კრისტალში ნაწილაკთა რაოდენობით, რაც ნივთიერების 1სმ³ მოცულობაში 10²³ რიგისაა. შესაძლებელია (1.15) განტოლებისათვის მოიძებნოს მხოლოდ მიახლოებითი ამოხსნა.

ამ მიზნით განვიხილოთ ადიაბატური (ბორნ-ოპენჰეიმერის) და ერთელექტრონიანი (პარტრი-ფოკის) მიახლოებანი. ადიაბატური მიახლოების არსი იმაში მდგომარეობს, რომ შრედინგერის განტოლება ჩავწეროთ ცალკე ელექტრონებისა და ცალკე ბირთვებისათვის. ვინაიდან ჩვენ მხოლოდ ელექტრონების მოძრაობა გვაინტერესებს, ამიტომ შეგვიძლია აღარ გავამახვილოთ ყურადღება ბირთვებისათვის ჩაწერილ განტოლებაზე. ერთელექტრონიან მიახლოებაში კი თითოეული ელექტრონის ურთიერთქმედება განიხილება არა ცალკეულ ელექტრონთან და ცალკეულ ბირთვთან, არამედ ბირთვებისა და დანარჩენი ელექტრონების მიერ შექმნილ, გასაშუალოებულ ელექტრულ ველებთან.

ა) ადიაბატური მიახლოება. ადიაბატური მიახლოება ითვალისწინებს განსხვავებას მძიმე და მსუბუქი ნაწილაკების მოძრაობის ხასიათში. ნაკლებად ინერტული ელექტრონებისათვის მნიშვნელოვანია ბირთვების განლაგების მყისიერი სურათი – ბირთვების მდებარეობის ნებისმიერი ცვლილებისას, პრაქტიკულად,

მყისიერად მყარდება ბირთვების ამ ახალი მდებარეობის შესაბამისი ელექტრონების სივრცული განაწილება; მაშინ, როდესაც ბირთვების ინერტულობის გამო, ელექტრონის მდებარეობის ცვლილება ვერ ახდენს მნიშვნელოვან გავლენას ბირთვის მოძრაობაზე – ამ შემთხვევაში განმსაზღვრელია ბირთვების ურთიერთქმედება ელექტრონების გასაშუალოებული სივრცული განაწილებით შექმნილ ველთან. აღნიშნული მსჯელობის საფუძველზე, ელექტრონის მოძრაობა, სიმარტივისათვის შეიძლება განვიხილოთ მესერში, რომლის კვანძები დაკავებულია უძრავი ბირთვებით. ამდენად, ენერჯის ათვის დონის შესაბამისი შერჩევით ნულს გაუტოლდება ბირთვების კინეტიკური და პოტენციური ენერჯიები:

$$\left\{ \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{R}_l|} \right\} \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1^0, \vec{R}_2^0, \dots, \vec{R}_n^0) = E_l \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \vec{R}_1^0, \vec{R}_2^0, \dots, \vec{R}_n^0) \quad (1.16)$$

\vec{R}_1^0 – უძრავი ბირთვის რადიუს-ვექტორია. ცვლადების რაოდენობის კიდევ უფრო შესამცირებლად, სავალენტო ელექტრონების გარდა, ყველა დანარჩენი ელექტრონი და ატომის ბირთვი შეიძლება წარმოვადგინოთ იონის სახით. ამ დროს (1.16) განტოლება ჩაიწერება მხოლოდ ფიქსირებული იონების პოტენციურ ველში მოძრავი სავალენტო ელექტრონებისათვის (სავალენტო აპროქსიმაცია).

ბ) ერთელექტრონიანი მიახლოება. მრავალელექტრონიანი ამოცანის ამოხსნის ერთ-ერთ ყველაზე უფრო გავრცელებულ ხერხს წარმოადგენს ჰარტრი-ფოკის მეთოდი, რომელიც საშუალებას იძლევა მრავალელექტრონიანი განტოლება დავიყვანოთ თითოეული ელექტრონისათვის ჩაწერილ განტოლებათა სისტემაზე. ერთი ელექტრონის დანარჩენი ელექტრონების მიერ შექმნილ გასაშუალოებულ ელექტრონულ ველთან ურთიერთქმედების პოტენციური ენერჯისათვის შემოვიღოთ შემდეგი აღნიშვნა:

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) \quad (1.17)$$

$\Omega_i(\vec{r}_i)$ – დამოკიდებულია არა მარტო ამ ველის შემქმნელი ელექტრონების მოძრაობაზე, არამედ იმ ელექტრონის მოძრაობაზეც, რომელიც ამ ველში განიხილება, ვინაიდან მისი მოძრაობა გავლენას ახდენს დანარჩენი ელექტრონების ქცევაზე. რამდენადაც ველი არა მარტო განსაზღვრავს მოცემული ელექტრონის მოძრაობას, არამედ თვითონაცაა დამოკიდებული მის მოძრაობაზე, ამიტომ მან თვითშეთანხმებული ველის სახელწოდება მიიღო.

ანალოგიურად, ერთი ელექტრონის ყველა ბირთვის მიერ შექმნილ ელექტრონულ ველთან ურთიერთქმედების პოტენციური ენერგია შეიძლება წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით:

$$-\sum_{i,l} \frac{Z_l e^2}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{R}_l|} = \sum_i V_i(\vec{r}_i). \quad (1.18)$$

(1.16)-ში (1.17) და (1.18)-ის გამოყენებით მივიღებთ შრედინგერის განტოლების შემდეგ სახეს:

$$\left\{ \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \sum_i \Omega_i(\vec{r}_i) + \sum_i V_i(\vec{r}_i) \right\} \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E_l \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \quad (1.19)$$

ელექტრონზე მოქმედი ბირთვებისა და ელექტრონების მიერ შექმნილი ელექტრული ველები შეიძლება განვიხილოთ როგორც ერთიანი ველის – კრისტალური ველის შემადგენელი ნაწილები. მაშინ

$$\Omega_i(\vec{r}_i) + V_i(\vec{r}_i) = U_i(\vec{r}_i) \quad (1.20)$$

(1.20)-ის (1.19)-ში გათვალისწინებით გვექნება:

$$\left\{ \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta_i + \sum_i U_i(\vec{r}_i) \right\} \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E_l \hat{H} \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E_l \Psi_l(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \quad (1.21)$$

ამ გამოსახულების მარტივი გარდაქმნა საშუალებას მოგვცემს დავიყვანოთ ის ერთპარამეტრიან განტოლებათა სისტემაზე. ვინაიდან (1.21)-დან გამომდინარე, სისტემის სრული ჰამილტონიანი ცალკეულ ელექტრონთა ჰამილტონიანების ჯამის ტოლია, სისტემის სრული ენერგია ტოლია ცალკეულ ელექტრონთა ენერგიების ჯამისა, ხოლო ტალღური ფუნქცია – ცალკეულ ელექტრონთა ტალღური ფუნქციების ნამრავლისა:

$$\begin{cases} \hat{H} = \sum_i \hat{H}_i \\ E_l = \sum_i E_i \\ \Psi_l = \prod \Psi_i \end{cases} \quad (1.22)$$

(1.22)-ის გამოყენებით (1.21) დაიყვანება ერთპარამეტრიან განტოლებათა სისტემაზე:

$$\begin{cases} \hat{H}_1 \Psi_1 = E_1 \Psi_1 \\ \hat{H}_2 \Psi_2 = E_2 \Psi_2 \\ \dots\dots\dots \\ \hat{H}_n \Psi_n = E_n \Psi_n \end{cases} \quad (1.23)$$

მაშასადამე, ერთელექტრონიან მიახლოებაში ელექტრონისათვის ჩაწერილი შრედინგერის განტოლება მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + U(\vec{r})\right\}\Psi(\vec{r}) = E_l\Psi(\vec{r}). \quad (1.24)$$

ამრიგად, ერთელექტრონიანი მიახლოება საშუალებას გვაძლევს ელექტრონები კრისტალში წარმოვიდგინოთ ისეთი ნაწილაკების სახით, რომლებიც ერთმანეთთან არ ურთიერთქმედებენ, ე.ი. მოძრაობენ ერთმანეთისგან დამოუკიდებლად. ამის საფუძველზე კი გამტარობის ელექტრონების ერთობლიობა შეგვიძლია განვიხილოთ როგორც იდეალური აირი.

ერთელექტრონიანი მიახლოების გამოყენების (შრედინგერის განტოლებაში მათემატიკური სირთულეების მოხსნის) მიუხედავად (1.24)-დან ელექტრონის ტალღური ფუნქციის და ენერჯიის დადგენა შეუძლებელია, ვინაიდან უცნობია ცხადი სახით ელექტრონის პოტენციური ენერჯია კრისტალურ ველში.

14. კრისტალური მესრის პერიოდული ველი. ბლოხის ტალღური ფუნქცია. კვაზიიმპულსი.

კრისტალში ელექტრონის ტალღური ფუნქციის შესახებ მსჯელობა შეიძლება კრისტალის პერიოდულობის თვისებაზე დაყრდნობით. ამ თავში ჩვენ, ძირითადად, ვიხილავთ იდეალურ კრისტალს. ცხადია, რომ ასეთ კრისტალში მესრის პერიოდულობა იდეალურად არის დაცული და, მაშასადამე, ელექტრონის პოტენციური ენერჯია კრისტალურ ველში $U(\vec{r})$ ასეთივე მკაცრი პერიოდულობით უნდა ხასიათდებოდეს. მესრის პერიოდულობას გამოსახავს ტრანსლაციის ვექტორი

$$\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (1.25)$$

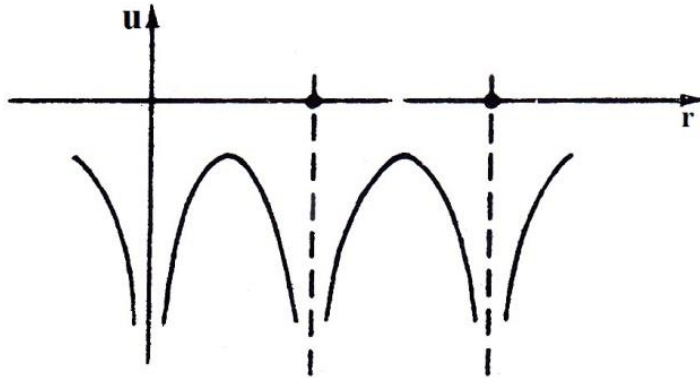
სადაც n_1, n_2, n_3 ნებისმიერი მთელი რიცხვებია, ხოლო $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ – საბაზისო ვექტორები განსაზღვრავენ მესრის პერიოდულობას სამივე მთავარი მიმართულებით. ტრანსლაციის ვექტორით წანაცვლება ნიშნავს საწყისი წერტილიდან იდენტურში გადაადგილებას (კრისტალური მესერი დაემთხვევა თავის თავს). მაშინ $U(\vec{r})$ -ის პერიოდულობის თვისება (ნახ. 1.2) ასე ჩაიწერება:

$$U(\vec{r} + \vec{n}) = U(\vec{r}) \quad (1.26)$$

(1.26)-დან, ანუ \vec{r} და $\vec{r} + \vec{n}$ წერტილების იდენტურობიდან გამომდინარე, ელექტრონის ტალღური ფუნქციებიც ამ წერტილებში შეიძლება მხოლოდ მუდმივი თანამამრავლით განსხვავდებოდნენ ერთმანეთისგან. ტალღური ფუნქციის ნორმირების პირობის (1.2) გათვალისწინებით, აღნიშნული კოეფიციენტის მოდულის კვადრატი ერთის ტოლი უნდა იყოს. ამდენად, იგი უნდა გამოისახოს წარმოსახ-

ვითი ექსპონენტი, რითაც გათვალისწინებული იქნება ის გარემოებაც, რომ ტალღური ფუნქცია ახასიათებს კრისტალში ელექტრონული ტალღის გავრცელებას:

$$\Psi(\vec{r} + \vec{n}) = e^{ik\vec{n}}\Psi(\vec{r}) \quad (1.27)$$



ნახ. 12. ერთგანზომილებიანი მესრის პერიოდული პოტენციალის სქემატური გამოსახულება

(1.27) პირობას ელექტრონის ტალღური ფუნქციის ტრანსლაციური თვისება ეწოდება. ვინაიდან ექსპონენტის ხარისხის მაჩვენებელი უგანზომილებო სიდიდე უნდა იყოს, ხოლო ტრანსლაციის ვექტორს \vec{n} -ს სიგრძის განზომილება აქვს, ამიტომ \vec{k} -ს უნდა ჰქონდეს სიგრძის შებრუნებული განზომილება. \vec{k} -ს ტალღური ვექტორი ეწოდება და ის ელექტრონული ტალღების გავრცელებას გვიჩვენებს კრისტალში. მისი მოდული ტალღური რიცხვის სახელწოდებას ატარებს

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (1.28)$$

მაშასადამე, კრისტალში ელექტრონის ტალღური ფუნქცია ყოველთვის დაკავშირებულია ტალღურ ვექტორთან, და ამდენად, ტალღურ ვექტორთან დაკავშირებული იქნება შრედინგერის განტოლებაში შემავალი ჰამილტონიანიც და ელექტრონის ენერჯიაც.

$$\hat{H}_{\vec{k}}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_{\vec{k}}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.29)$$

ელექტრონის ენერჯიის მის ტალღურ ვექტორზე დამოკიდებულებას

$$E = E(\vec{k}) \quad (1.30)$$

დისპენსიის კანონი ეწოდება და ის მთლიანად განსაზღვრავს ელექტრონის დინამიურ თვისებებს კრისტალში. ამიტომ $E(\vec{k})$ დამოკიდებულების დადგენა ზონური თეორიის ძირითად ამოცანას წარმოადგენს.

კრისტალური ველის და ტალღური ფუნქციის სიმეტრიულობიდან გამომდინარე, შრედინგერის განტოლების ამოუხსნელად, ელექტრონის ტალღური ფუნქცია კრისტალში შემდეგი სახით შეიძლება ჩაიწეროს:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.31)$$

მას ბლოხის ტალღური ფუნქცია ეწოდება. როგორც ვხედავთ, ბლოხის ტალღური ფუნქცია წარმოადგენს ბრტყელ ტალღას $e^{i\vec{k}\vec{r}}$, რომელიც მოდულირებულია პერიოდული $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ ფუნქციით. ამ ფუნქციის პერიოდულობა მესრის პერიოდულობით განისაზღვრება:

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{n}) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}).^* \quad (1.32)$$

ბლოხის ტალღური ფუნქციის ფიზიკური არსი იმაში მდგომარეობს, რომ თავისუფალი სივრციდან ელექტრონის კრისტალში გადასვლისას კრისტალური მესრის პერიოდული ველი იწვევს ელექტრონის ტალღური ფუნქციის ამპლიტუდურ მოდულაციას.

ფიზიკური პარამეტრების კარგად ცნობილი მუდმივობის კანონები (ენერჯის, იმპულსის, მოძრაობის რაოდენობის მომენტის და სხვა) გამოსახავენ სივრცის და დროის სიმეტრიულობის თვისებებს. კერძოდ, სივრცის ერთგვაროვნებას – ნებისმიერი წანაცვლებისას მისი თვისებების უცვლელობას გამოხატავს იმპულსის მუდმივობის კანონი. კრისტალში მოძრავი ელექტრონისათვის იმპულსის მუდმივობა უნდა ნიშნავდეს მასზე მოქმედი ყველა ძალების ტოლქმედის ნულთან ტოლობას. მაგრამ ელექტრონი კრისტალში ყოველთვის განიცდის პერიოდული კრისტალური ველის მოქმედებას. მაშინ, მესრის ტრანსლაციურ თვისებებს უნდა შეესაბამებოდეს გარკვეული ფიზიკური სიდიდე, რომელიც იქნება მუდმივი კრისტალურ ველში ნაწილაკის მოძრაობისას, თუ ნაწილაკზე მოქმედი გარე ძალები ნულის ტოლია. ამ პარამეტრს კვაზიიმპულსს უწოდებენ და ის დაკავშირებულია ელექტრონის ტალღურ ვექტორთან შემდეგი მარტივი გამოსახულებით:

$$\vec{P} = \hbar\vec{k}. \quad (1.33)$$

მაშასადამე, დისპენსიის კანონი (1.30), კრისტალში მოძრავი ელექტრონის ენერჯის მის კვაზიიმპულსზე დამოკიდებულებასაც გამოხატავს.

1.5. თითქმის თავისუფალი და ძლიერად ბმული ელექტრონის მიახლოებები

როგორც აღვნიშნეთ, ერთელექტრონიან მიახლოებაში ჩაწერილი შრედინგერის განტოლება (1.24) მართალია ერთპარამეტრიანია, მაგრამ ამ განტოლებიდან

*შემდგომში, გამოსახულების ჩაწერის გამარტივების მიზნით ინდექსი \vec{k} გამოყენებული არ იქნება.

ელექტრონის ენერჯიის განსაზღვრა მაინც შეუძლებელია, ვინაიდან უცნობია ცხადი სახით კრისტალური ველის ენერჯიის $U(\vec{r})$ -ის გამოსახულება. ამდენად, აუცილებელი ხდება კვლავ მიახლოებითი მეთოდების გამოყენება (1.24) განტოლების შემდგომში გამარტივებისა და ელექტრონის ენერჯიის დადგენის მიზნით. თუ გამოვიყენებთ შეშფოთების თეორიის მეთოდს, მაშინ კრისტალის პერიოდული ველის გავლენა ელექტრონზე განიხილება როგორც მცირე შეშფოთება, ხოლო ნულოვანი მიახლოების შერჩევის მიხედვით მივაღწეოთ ორ პოლარულ მოდელამდე.

ა) **თითქმის თავისუფალი ელექტრონის მიახლოება.** ეს მიახლოება გულისხმობს, რომ ელექტრონის პოტენციური ენერჯია კრისტალის პერიოდულ ველში მნიშვნელოვნად მცირეა ელექტრონის კინეტიკურ ენერჯისთან შედარებით.

ამდენად, ნულოვან მიახლოებად მიიჩნევენ თავისუფალი ელექტრონის მოძრაობას, ხოლო კრისტალური ველის გავლენა განიხილება როგორც შეშფოთება $\hat{W}(\vec{r}) = \hat{U}(\vec{r})$. მაშასადამე, ჰამილტონიანი (1.24) იქნება წარმოდგენილი როგორც

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r}) \quad (1.34)$$

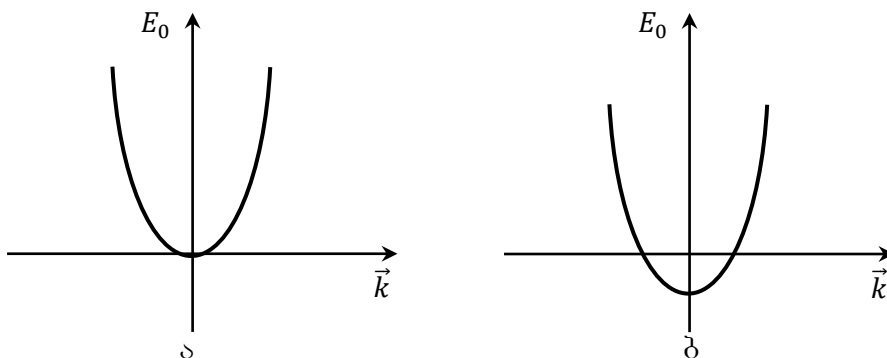
სადაც \hat{H}_0 თავისუფალი ელექტრონის კინეტიკურ ენერჯიას გამოხატავს

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \quad (1.35)$$

ნულოვანი მიახლოების შესაბამისი შრედინგერის განტოლების

$$\hat{H}_0 \Psi_0(\vec{r}) = E_0 \Psi_0(\vec{r}) \quad (1.36)$$

ამონახსნი კარგად არის ცნობილი - $\Psi_0(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}}$ (დე ბროილის ბრტყელი ტალღა) და $E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ (დისპერსიის კვადრატული კანონი). ამდენად, ამოცანა დაიყვანება ნულოვანი მიახლოების ენერჯიისათვის შესწორებების შერჩევაზე (ცხადია, რომ ასეთი მიდგომა კარგ რაოდენობრივ შედეგს მოგვცემს ლითონისათვის). პირველ მიახლოებაში პერიოდული ველის გათვალისწინება შეშფოთების სახით განაპირობებს მხოლოდ E_0 ენერჯიის წანაცვლებას მუდმივი, \vec{k} -გან დამოუკიდებელი, U სიდიდით, ე.ი. $E(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + U$ (ნახ. 1.3.)



ნახ. 1.3. ელექტრონის ენერჯიის სპექტრი შეშფოთების თეორიის ნულოვან (ა) და პირველ (ბ) მიახლოებებში

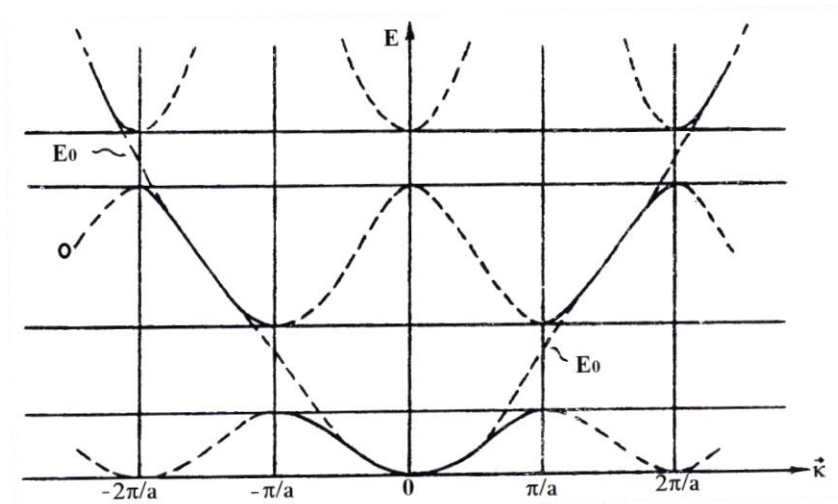
მეორე მიახლოებაში შესწორება პრაქტიკულად ნულის ტოლია, თუმცა არსებობს ელექტრონის ისეთი მდგომარეობებიც, რომლისთვისაც შესწორება მიისწრაფის უსასრულობისკენ. ამ წერტილებში ენერჯია წყვეტას განიცდის. ელექტრონის აღნიშნული მდგომარეობები განლაგებულნი არიან სიბრტყეებზე, რომლებიც აკმაყოფილებენ ვულფ-ბრევის განტოლებას:

$$(\vec{b}, \vec{k} + \pi\vec{b}) = 0 \quad (1.37)$$

b შებრუნებული მესრის ვექტორია* და $|\vec{b}| = \frac{n}{d}$. აქ d არის კრისტალური მესრის ატომურ სიბრტყეებს შორის მანძილი, n – მთელი რიცხვი. (1.37) განტოლებაში შებრუნებული მესრის ვექტორის (ელექტრონის ტალღური რიცხვის $(|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda})$) მნიშვნელობების და ელექტრონული ტალღის ატომურ სიბრტყეზე დაცემის θ კუთხის (კუთხე სიბრტყის ნორმალსა და \vec{k} ვექტორს შორის) გათვალისწინებით მიიღება ვულფ-ბრევის ცნობილი გამოსახულება ტალღების ინტერფერენციისათვის კრისტალში

$$2d\cos\theta = n\lambda \quad (1.38)$$

ენერჯიის წყვეტა გამოწვეულია λ -ს (და ე.ი. \vec{k} -ს) ზოგიერთი მნიშვნელობებისათვის ელექტრონული ტალღების ჩაქრობით მათი ინტერფერენციის გამო. ენერჯიის წყვეტა განაპირობებს ენერჯიის სპექტრის წყვეტასაც – ყალიბდება აკრძალული ზონები (ნახ. 1.4). დაშვებულ ზონებში კვლავ მართებულია დისპერსიის კვადრატული კანონი.



*შებრუნებული მესრის ბაზისის ვექტორები განხილულია II თავის §2-ში.

ნახ. 14. კრისტალში მოძრავი ელექტრონის $E(\vec{k})$ და თავისუფალი ელექტრონის $E_0(\vec{k})$ დისპერსიის კანონები (წყვეტილით ნაჩვენებია $E(\vec{k})$ დამოკიდებულება მომიჯნავე ბრილუენის ზონებში)

ბ) **კლიერალ ბმული (კვაზიბმული) ელექტრონის მიახლოება.** ამ მოდელს საფუძვლად უდევს მოსაზრება, რომ ელექტრონის მდგომარეობა კრისტალში უმნიშვნელოდ განსხვავდება მისი მდგომარეობისაგან იზოლირებულ ატომში. მოდელი კარგ რაოდენობრივ შედეგს იძლევა დიელექტრიკებისათვის, ხოლო ნახევრად გამტარისათვის საშუალებას გვაძლევს ვიმსჯელოთ (რეალურად მხოლოდ თვისობრივად) ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრის ძირითად კანონზომიერებებზე.

სიმარტივისათვის კვაზიბმული ელექტრონის მოდელი განვიხილოთ a მესრის მუდმივას მქონე ერთგანზომილებიანი, ერთი ტიპის ატომებისგან შემდგარი კრისტალის მაგალითზე. ავირჩიოთ ატომების ამ ჯაჭვში l -ური ატომი, რომლის რადიუს-ვექტორია \vec{R}_l , ხოლო მისი რომელიმე ელექტრონის $- \vec{r}$. მაშინ ამ ელექტრონის რადიუს-ვექტორი სკუთარი ბირთვის მიმართ იქნება $\vec{r} - \vec{R}_l$ და ელექტრონის ტალღური ფუნქცია ატომში

$$\Psi_l = \Psi_l(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad (1.39)$$

მოდელის არსიდან გამომდინარე, ელექტრონის ტალღური ფუნქცია კრისტალში შეიძლება ჩაიწეროს ატომში ტალღური ფუნქციების წრფივი კომბინაციების სახით

$$\Psi_k(\vec{r}) = \sum_l a_l \Psi_l(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad (1.40)$$

იმისათვის, რომ $\Psi(\vec{r})$ -ს ჰქონდეს ბლოხის ტალღური ფუნქციის სახე, აუცილებელია a_l კოეფიციენტის შემდგენაირად წარმოდგენა:

$$a_l = e^{i\vec{k}\vec{R}_l} \quad (1.41)$$

გამოვიყენოთ (1.40) შრედინგერის (1.29) განტოლებაში, მაშინ:

$$\sum_l a_l \{ \hat{H} \Psi_l - E \Psi_l \} = 0, \quad (1.42)$$

სადაც (1.24) -ის შესაბამისად

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(\vec{r}) \quad (1.43)$$

კვაზიბმული ელექტრონის მოდელი გვაძლევს უფლებას ერთელექტრონიან მიახლოებაში ჩაწერილი შრედინგერის განტოლების შემდგომი გამარტივებისას, კრისტალში და იზოლირებულ ატომში ელექტრონის ენერგიათა შედარებით, ნაწილობრივ მაინც ავუაროთ გვერდი $U(\vec{r})$ -თან დაკავშირებულ სირთულეებს. იზო-

ლირებულ ატომში რაღაც a -ურ დონეზე მყოფი, $U_a(\vec{r})$ პოტენციური ენერჯიის მქონე ელექტრონის შრედინგერის განტოლებაა

$$\hat{H}_a \Psi_l = E_a \Psi_l \quad (1.44)$$

სადაც

$$\hat{H}_a = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U_a(\vec{r}) \quad (1.45)$$

მაშინ (1.43) და (1.45)-ის შედარებით გვექნება:

$$\hat{H} - \hat{H}_a = U(\vec{r}) - U_a(\vec{r}) \quad (1.46)$$

ან

$$\hat{H} = \hat{H}_a + W(\vec{r}) \quad (1.47)$$

(1.47) გამოსახულებაში

$$W(\vec{r}) = U(\vec{r}) - U_a(\vec{r}) \quad (1.48)$$

შეშფოთების ენერჯიას წარმოადგენს. იგი განსაზღვრავს ელექტრონის პოტენციური ენერჯიის ცვლილებას იზოლირებული ატომიდან კრისტალური მესრის ჩამოყალიბებისას. ცხადია, რომ კვაზიბმული ელექტრონის მოდელის ფარგლებში $W(\vec{r})$ მცირედ განსხვავდება ნულისგან.

გავითვალისწინოთ (1.47) ჰამილტონიანი (1.42)-ში, მაშინ

$$\sum_l a_l \{ \hat{H}_a \Psi_l + W(\vec{r}) \Psi_l - E \Psi_l \} = 0 \quad (1.49)$$

თუ (1.44) ჩავსვათ (1.49)-ში:

$$\sum_l a_l \{ W(\vec{r}) \Psi_l + (E_a - E) \Psi_l \} = 0 \quad (1.50)$$

(1.50)-დან ელექტრონის E ენერჯიის განსასაზღვრავად გავამრავლოთ ეს განტოლება მეზობელი კვანძისათვის ჩაწერილი ელექტრონის ტალღური ფუნქციის კომპლექსურ შეუღლებულზე Ψ_l^* და მოვახდინოთ ინტეგრება კრისტალის მოცულ V მოცულობაზე, მივიღებთ

$$\sum_l a_l \left\{ \int_V \Psi_l W(\vec{r}) \Psi_l^* dV + (E_a - E) \int_V \Psi_l \Psi_l^* dV \right\} = 0 \quad (1.51)$$

ამ უკანასკნელ გამოსახულებაში შემავალ ორივე ინტეგრალს მეტად ღრმა ფიზიკური შინაარსი გააჩნია.

განვიხილოთ ჯერ პირველი ინტეგრალი, რომელიც გაცვლითი ინტეგრალის სახელწოდებით არის ცნობილი.

$$\int_V \Psi_l W(\vec{r}) \Psi_l^* dV \equiv A(\vec{R}_l - \vec{R}_l'), \quad (1.52)$$

როგორც (1.52) გამოსახულებიდან გამომდინარეობს, მისი სიდიდე ორ ფაქტორზეა დამოკიდებული: 1) ელექტრონული გარსების გადაფარვის ხარისხზე. კვაზიბმული ელექტრონის მოდელის არსიდან გამომდინარე, გარსების გადაფარვა

უმნიშვნელოა და ამდენად, ნულისკენ უნდა მიისწრაფოდეს ამ გადაფარვის გამომხატველი ტალღური ფუნქციების ნამრავლი. 2) შეშფოთების ენერგიაზე ($W(\vec{r}) = 0$).

ამრიგად, გაცვლითი ინტეგრალი განსხვავებულია ყოველთვის ნულისგან, თუმცა მისი სიდიდე მცირეა, ამიტომ:

1) კვაზიბმული ელექტრონის მოდელის ფარგლებშიც კი ელექტრონის მოძრაობა დაშვებულია.

2) ელექტრონის მოძრაობა კრისტალში შესაძლებელია მხოლოდ უახლოეს მეზობელ ატომებს შორის ელექტრონების გაცვლით.

მეორე ინტეგრალი (1.51)-ში მხოლოდ ტალღური ფუნქციების ნამრავლზეა დამოკიდებული, ე.ი. განისაზღვრება მხოლოდ ელექტრონული გარსების გადაფარვის ხარისხით

$$\int_V \Psi_l \Psi_l^* dV \equiv S(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'}), \quad (1.53)$$

ამდენად, მისი მნიშვნელობა კვაზიბმული ელექტრონის მოდელის ფარგლებში ნულის ტოლად შეიძლება ჩაითვალოს მეზობელი ატომებისათვისაც კი

$$S(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'}) = \begin{cases} 0 & \text{თუ } \vec{R}_l \neq \vec{R}_{l'} \\ 1 & \text{თუ } \vec{R}_l = \vec{R}_{l'} \end{cases} \quad (1.54)$$

(1.52) და (1.53) გამოსახულებები ჩავსვათ (1.51)-ში

$$\sum_l a_l \{A(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'}) + (E_a - E)S(\vec{R}_l - \vec{R}_{l'})\} = 0 \quad (1.55)$$

გავამრავლოთ (1.55) შემდეგ ექსპონენტაზე $e^{i\vec{k}\vec{R}_l}$ და შემოვიტანოთ აღნიშვნა

$$\vec{R}_l - \vec{R}_{l'} = \vec{q}, \quad (1.56)$$

სადაც \vec{q} არის ორი l და l' ატომების შემაერთებელი ვექტორი, მაშინ

$$\sum_q e^{i\vec{k}\vec{q}} \{A(\vec{q}) + (E_a - E)S(\vec{q})\} = 0 \quad (1.57)$$

ამ უკანასკნელი გამოსახულებიდან განვსაზღვროთ კრისტალში ელექტრონის ენერგიის სიდიდე

$$E = E_a + \frac{\sum_q e^{i\vec{k}\vec{q}} A(\vec{q})}{\sum_q e^{i\vec{k}\vec{q}} S(\vec{q})}. \quad (1.58)$$

(1.58)-დან გამომდინარეობს, რომ იზოლირებული ატომების ელექტრონების დისკრეტული ენერგეტიკული დონეები, ამ ატომებიდან კრისტალის ჩამოყალიბებისას, იშლებიან ენერგეტიკულ ზონებად, რომელთა საზღვრები დამოკიდებულია (1.58) გამოსახულების მეორე შესაკრების მინიმალურ და მაქსიმალურ მნიშვნელობაზე.

(1.54) გამოსახულების ძალით, კვაზიბმული ელექტრონის მოდელის ფარგლებში

$$\sum_q e^{i\vec{k}\vec{q}} S(\vec{q}) = 1 \quad (1.59)$$

და $(\vec{q}) = 0$ მნიშვნელობისათვის გაცვლითი ინტეგრალი იქნება \vec{k} -გან დამოუკიდებელი მუდმივი სიდიდე

$$A(0) = \int_V |\Psi_l|^2 W(\vec{r}) dV = C, \quad (1.60)$$

ძლიერად ბმული ელექტრონის მოდელის არსიდან გამომდინარე, აზრი აქვს განვიხილოთ გაცვლითი ინტეგრალი მხოლოდ უახლოესი მეზობელი ატომებისათვის. ერთი ტიპის ატომებისგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი ატომური ჯაჭვისათვის (1.58)-ში გათვალისწინებული უნდა იყოს $q = +a$ და $q = -a$ სიდიდეთა შესაბამისი, და ცხადია, ერთმანეთის ტოლი გაცვლით ინტეგრალის მნიშვნელობანი:

$$A(a) = A(-a) \equiv A \quad (1.61)$$

და ასევე:

$$\begin{aligned} \sum e^{i\vec{k}\vec{q}} &= e^{i\vec{k}_x a} + e^{-i\vec{k}_x a} + e^{i\vec{k}_y a} + e^{-i\vec{k}_y a} + e^{i\vec{k}_z a} + e^{-i\vec{k}_z a} = \\ &= 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \end{aligned} \quad (1.62)$$

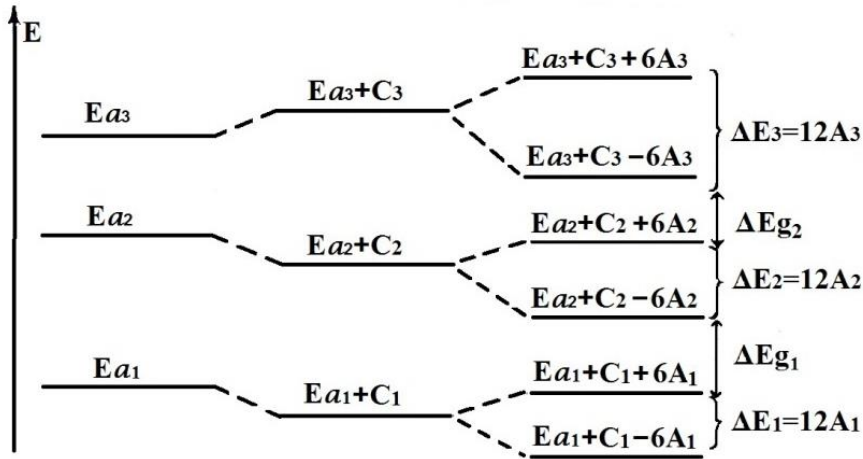
(1.59)-(1.62) გამოსახულებების (1.58)-ში გათვალისწინებით ელექტრონის ენერჯისათვის მივიღებთ

$$E = E_0 + C + 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (1.63)$$

ამ ფორმულის ანალიზი საშუალებას გვაძლევს გავაკეთოთ შემდეგი დასკვნები:

1) იზოლირებული ატომის ნებისმიერი ენერგეტიკული დონე კრისტალური მესრის ჩამოყალიბებისას წაინაცვლებს C სიდიდით, თანაც C შეიძლება იყოს როგორც დადებითი, ასევე უარყოფითი.

2) (1.63) გამოსახულების მესამე შესაკრების ძალით გაცვლითი ურთიერთქმედება უნდა განაპირობებდეს ენერგეტიკული დონის ენერგეტიკულ ზონად გახლეჩვას (ნახ. 1.5).



ნახ. 1.5. ენერგეტიკული დონეებიდან ენერგეტიკული ზონების ჩამოყალიბების სქემა

3) ზონის მინიმალური და მაქსიმალური ენერგიები დამოკიდებულია A სიდიდეზე და დაკავშირებულია \cos -ის ფუნქციის ექსტრემუმების $\cos k_i a = \pm 1$ მნიშვნელობებთან

$$\begin{cases} E_{max} = E_a + C + 6A \\ E_{min} = E_a + C - 6A \end{cases} \quad (1.64)$$

4) დაშვებული ზონის სიგანე მხოლოდ A გაცვლითი ინტეგრალით განისაზღვრება

$$\Delta E = E_{max} - E_{min} = 12A \quad (1.65)$$

5) დაშვებული ზონის სიგანე იზრდება ენერგიის ზრდასთან ერთად, რადგანაც გარე გარსებისათვის გადაფარვის ხარისხი მატია. როგორც წესი, ამას თანახმად აკრძალული ზონის სიგანის შემცირება.

6) კრისტალში ელექტრონის ენერგია დამოკიდებულია ტალღურ ვექტორზე. თანაც, იგი ლუწი ფუნქციაა.

$$E(\vec{k}) = E(-\vec{k}) \quad (1.66)$$

7) კრისტალზე გარეშე ზემოქმედების (ტემპერატურა, წნევა, ელექტრული ველი და ა.შ.) შედეგად იცვლება ატომებს შორის მანძილი და, შესაბამისად, გაცვლითი ინტეგრალის სიდიდეც; ცხადია, რომ ამის გამო შეიცვლება ენერგეტიკული ზონის სიგანეც ΔE და აკრძალული ზონის სიგანეც ΔE_g .

1.6. ელექტრონის მდგომარეობათა რაოდენობა დაშვებულ ზონაში

დავადგინოთ დაშვებულ ზონაში ელექტრონისათვის ენერგეტიკული გონეების რაოდენობა. საკითხის განხილვისას გვექნება აგრეთვე საშუალება განვსაზღვროთ ელექტრონის ტალღური ვექტორის ცვლილების არე.

დასმული ამოცანის გადასაწყვეტად ავიღოთ პარალელეპიპედის ფორმის კრისტალი, რომლის ზომებია L_x, L_y, L_z , ხოლო მესრის მუდმივა a , მაშინ

$$L_x = aN_x; L_y = aN_y; L_z = aN_z; \quad (1.67)$$

სადაც N_x, N_y, N_z ატომების რაოდენობაა შესაბამის მიმართულებებზე.

გამოვიყენოთ ამ კრისტალისათვის ბორნ-კარმანის ციკლური პირობა, რომელიც მოითხოვს მოპირდაპირე წახნაგებზე ელექტრონის ტალღური ფუნქციის ტოლობას

$$\Psi(x + L_x, y, z) = \Psi(x, y, z). \quad (1.68)$$

ამ პირობას არ ახლავს არავითარი ფიზიკური შეზღუდვა, მაგრამ, ცხადია, ტალღური ფუნქცია ბლოხის პირობას უნდა აკმაყოფილებდეს

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.69)$$

იმისათვის, რომ (1.68) და (1.69) გამოსახულებები ერთდროულად შესრულდეს, საჭიროა (1.68) პირობის მარცხენა მხარე შემდეგნაირად წარმოვადგინოთ:

$$\Psi(x + L_x, y, z) = e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{ik_x L_x} e^{ik_y L_y} e^{ik_z L_z}, \quad (1.70)$$

თუ (1.70)-ს გავითვალისწინებთ (1.68)-ში გვექნება

$$e^{ik_x L_x} e^{ik_y L_y} e^{ik_z L_z} = 1 \quad (1.71)$$

ეს პირობა შესრულდება იმ შემთხვევაში, თუ ექსპონენტის მაჩვენებელი 2π -ზე გამრავლებულ მთელ რიცხვს წარმოადგენს

$$k_x L_x = 2\pi n_x, \quad k_y L_y = 2\pi n_y, \quad k_z L_z = 2\pi n_z, \quad (1.72)$$

სადაც $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ამ უკანასკნელი (1.72) გამოსახულებიდან მარტივად განვსაზღვრავთ კრისტალში მყოფი ელექტრონისათვის ტალღური ვექტორის შესაძლო მნიშვნელობებს

$$\left. \begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi n_x}{L_x} = \frac{2\pi n_x}{aN_x} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n_x}{N_x} \\ k_y &= \frac{2\pi n_y}{L_y} = \frac{2\pi n_y}{aN_y} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n_y}{N_y} \\ k_z &= \frac{2\pi n_z}{L_z} = \frac{2\pi n_z}{aN_z} = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n_z}{N_z} \end{aligned} \right\} N_i = 1, 2, 3, \dots \quad (1.73)$$

(1.73) გამოსახულება საშუალებას გვაძლევს გავაკეთოთ შემდეგი დასკვნა \vec{k} -ს მნიშვნელობათა სიმრავლის შესახებ - ელექტრონის ტალღური ვექტორის მნიშვნელობათა სიმრავლე დისკრეტულია. აქედან გამომდინარე, დაკვანტულია დაშვებულ ზონაში ელექტრონის ენერგიაც.

ტალღური ვექტორის ცვლილების საზღვრების დასადგენად დავეყრდნობთ კვაზიბმული ელექტრონის მოდელში ჩაწერილ ტალღური ფუნქციის გამოსახულებას ერთგანზომილებიან შემთხვევაში

$$\Psi(x) = \sum_l e^{ik_x a l} \Psi_l = \sum_l e^{i \frac{2\pi n_x}{N_x} l} \Psi_l, \quad (1.74)$$

სადაც გათვალისწინებულია, რომ $R_l = al$, l – ატომის ნომერია (ე.ი. მთელი რიცხვია), $L_x = aN_x$. $\Psi(x)$ ფუნქცია პერიოდულად მიიღებს ერთი და იგივე სიდიდეს როდესაც $-n_x = 0$ და $\pm N_x$, $n_x = 1$ და $\pm(N_x + 1)$ და ა.შ. n_x იღებს მხოლოდ დადებით მნიშვნელობებს (1.66)-დან გამომდინარე

$$0 \leq \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} < \begin{pmatrix} N_x \\ N_y \\ N_z \end{pmatrix} \quad (1.75)$$

(1.75) პირობის (1.73)-ში გათვალისწინებით

$$\begin{pmatrix} 0 \leq k_x \leq \frac{2\pi}{a} \\ 0 \leq k_y \leq \frac{2\pi}{a} \\ 0 \leq k_z \leq \frac{2\pi}{a} \end{pmatrix} \quad \text{ან} \quad -\frac{\pi}{a} \leq \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} < \frac{\pi}{a} \quad (1.76)$$

ამ (1.76) გამოსახულებით განსაზღვრულ \vec{k} ტალღური ვექტორის მნიშვნელობათა არეს ბრილუენის პირველ ანუ დაყვანილ ზონას უწოდებენ. \vec{k} -ს მნიშვნელობათა რიცხვი $N = N_x N_y N_z$ განისაზღვრება შესაბამისი მიმართულებით ატომების რაოდენობების ნამრავლით. ენერგიის ტალღურ ვექტორზე დამოკიდებულების გამო, ცხადია, დაშვებული ზონის ფარგლებში ენერგეტიკულ დონეთა რიცხვიც იქნება N , რომლის შედარებით მარტივი გზით დასადგენად გამოვიყენოთ კრისტალის ხაზოვანი ზომები

$$N = N_x N_y N_z = \frac{L_x L_y L_z}{a^3} = \frac{V}{a^3} \quad (1.77)$$

(1.77) გამოსახულების ძალით ზონაში ენერგეტიკულ დონეთა რიცხვი განისაზღვრება კრისტალის მოცულობის ფარდობით ამ კრისტალის ელემენტარული უჯრედის მოცულობასთან (ანუ კრიტალში ელემენტარული უჯრედების რაოდენობით). ვინაიდან, პაულის პრინციპის თანახმად, დონეზე შეიძლება განლაგდეს ორი ელექტრონი საპირისპირო სპინებით, ამიტომ ელექტრონისათვის კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი იქნება $N_e = 2N$.

შევაფასოთ კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი რეალური კრისტალისათვის, რომლის მოცულობა ავიღოთ 1სმ^3 -ის, ხოლო მესრის მუდმივა 5\AA -ის ტოლად. (1.77)-ში ამ რიცხვითი მნიშვნელობების გათვალისწინებით მივიღებთ 10^{22} დონეთა რიცხვს. 1ევ სივანის დაშვებული ზონისათვის დონეთა შორის ენერგეტიკული ღრე-

ხო გამოვა იმდენად მცირე (10^{-22} ეე), რომ ელექტრონის ენერგია ზონის ფარგლებში კვაზიუწყვეტად შეიძლება მივიჩნიოთ.

1.7. ელექტრონის ენერგიის ტალღურ ვექტორზე დამოკიდებულების სახე

ელექტრონის ტალღური ვექტორის მნიშვნელობების სახის და ცვლილების არის დადგენის შემდეგ შესაძლებელი ხდება კვაზიმუმი ელექტრონის მოდელში ელექტრონის ენერგიისათვის მიღებული (1.63) გამოსახულების შემდგომი გამარტივება და ანალიზი.

სიმარტივისათვის, თავდაპირველად, განვიხილოთ ერთგანზომილებიანი შემთხვევა და შემდეგ განვაზოგადოთ იგი სამგანზომილებიანი კრისტალისათვის. შემოვიტანოთ აღნიშვნა

$$E_0 = E_a + C \tag{1.78}$$

მაშინ (1.78)-ის გათვალისწინებით (1.63) მიიღებს სახეს

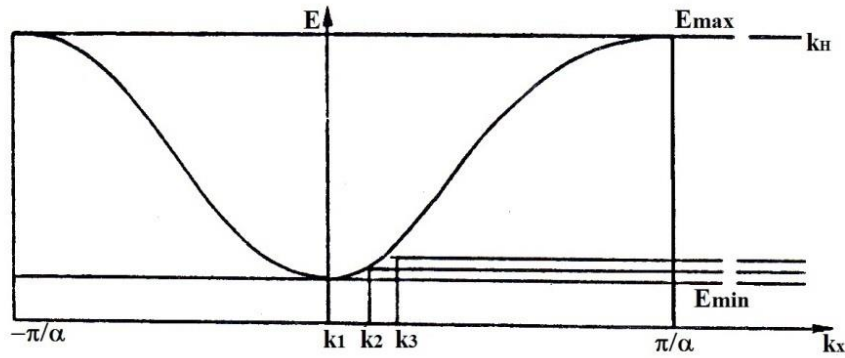
$$E = E_0 + 2A \cos k_x a. \tag{1.79}$$

გაცვლითი ინტეგრალი A , რომელიც დამოკიდებულია შეშფოთების ენერგიასა და ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ხარისხზე, შეიძლება იყოს როგორც დადებითი ასევე უარყოფითი.

1) სფერული ელექტრონული გარსის მქონე s – ატომური მდგომარეობებისათვის $A < 0$, ე.ი.

$$E = E_0 - 2|A| \cos k_x a \tag{1.80}$$

წარმოვადგინოთ (1.80) გამოსახულება გრაფიკულად k_x -ს მნიშვნელობათა ცვლილების არის გათვალისწინებით (ნახ. 1.6). როგორც გარაფიკიდან ჩანს, გაცვლითი ინტეგრალის უარყოფითი მნიშვნელობის შემთხვევაში ბრილუენის ზონის ცენტრს ($k_x = 0$) შეესაბამება ელექტრონის ენერგიის მინიმალური მნიშვნელობა, ხოლო ბრილუენის ზონის კიდეებზე ($|k_x| = \frac{\pi}{a}$) ელექტრონის ენერგია იღებს თავის მაქსიმალურ მნიშვნელობას. ასეთი სახის დამოკიდებულება ენერგიასა და ტალღურ ვექტორს შორის დამახასიათებელია იდეალური ნახევრად გამტარის გამტარობის ზონისათვის.



ნახ. 1.6. $E(k_x)$ დამოკიდებულება s - მდგომარეობებით შექმნილი ზონისთვის

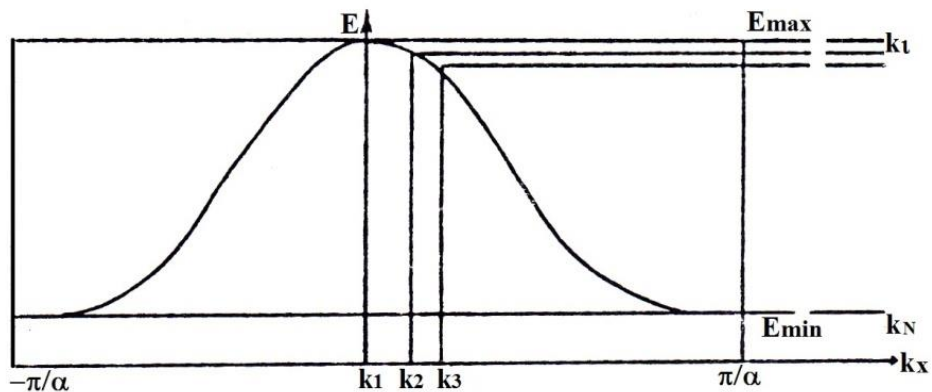
2) p -ატომური მდგომარეობისათვის $A > 0$ და

$$E = E_0 + 2|A|\cos k_x a \quad (1.81)$$

(1.81)-ის შესაბამისი გრაფიკული გამოსახულება მოცემულია ნახ. 1.7-ზე. ამ შემთხვევაში ბრილუენის ზონის ცენტრს ($k_x = 0$) შეესაბამება ენერჯის მაქსიმალური მნიშვნელობა, ხოლო ბრილუენის ზონის კიდეებზე ($|k_x| = \frac{\pi}{a}$) გვაქვს ენერჯის მინიმალური მნიშვნელობა. ასეთი სახის დამოკიდებულება დამახასიათებელია იდეალური ნახევრად გამტარის სავალენტო ზონისათვის.

ამრიგად, ზონების ექსტრემალური მდგომარეობანი (გამტარობის ზონის მინიმუმი და სავალენტო ზონის მაქსიმუმი) იდეალურ ნახევრად გამტარში განლაგებულია ბრილუენის ზონის ცენტრში $\vec{k} = 0$ წერტილში.

როგორც ამ თავის დასაწყისში აღვნიშნეთ, ნახევრად გამტარში მიმდინარე ესა თუ ის ფიზიკური მავლენა ძირითადად ელექტრონებთანაა დაკავშირებული და როგორც წესი, ამ მოვლენებში მნიშვნელოვან როლს თამაშობს ის ელექტრონები, რომელთა ენერჯია შეესაბამება ან სავალენტო ზონის ჭერს, ან გამტარობის ზონის ფსკერს. ამრიგად, იდეალური ნახევრად გამტარის განხილვისას, უმეტეს შემთხვევაში, შეიძლება შემოვიფარგლოთ \vec{k} -ს იმ მნიშვნელობებით, რომლებიც ბრილუენის ზონის ცენტრის მახლობლად არიან განლაგებული.



ნახ. 1.7. $E(k_x)$ დამოკიდებულება p – მდგომარეობებით შექმნილი ზონისათვის

განვაზოგადოთ მიღებული შედეგები სამგანზომილებიანი კრისტალის შემთხვევისათვის. თუ გავითვალისწინებთ, რომ საკმარისია შემოვიფარგლოთ ტალღური ვექტორის ნულისგან მცირედ განსხვავებული მნიშვნელობებით, მაშინ ელექტრონის ენერჯიის გამოსახულება შეიძლება წარმოვადგინოთ მწკრივის სახით.

1) გავანალიზოთ (1.63) ფორმულა გამტარობის ზონის ფსკერის მახლობელი მდგომარეობებისათვის ($A < 0$), მაშინ

$$\begin{aligned} E &= E_0 - 2|A| \left\{ \left[1 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 \right] + \left[1 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 \right] + \left[1 - \frac{1}{2}(k_z a)^2 \right] \right\} = \\ &= E_0 - 6|A| + |A|a^2(k_x^2 k_y^2 k_z^2) = (E_0 - 6|A|) + |A|a^2 k^2 \end{aligned} \quad (1.82)$$

თუ (1.82) გამოსახულებაში ავიღებთ $\vec{k} = 0$ მნიშვნელობას მაშინ ელექტრონის ენერჯია ტოლი იქნება $E = E_0 - 6|A|$ და, ე.ი. გამტარობის ზონის მინიმალური ენერჯია განისაზღვრება ფორმულით

$$E_C = E_0 - 6|A| \quad (1.83)$$

(1.83)-ის გათვალისწინებით (1.82)-ში მივიღებთ

$$E = E_C + |A|a^2 k^2 \quad (1.84)$$

ამ უკანასკნელ გამოსახულებას ეწოდება დისპერსიის კანონი იდეალური ნახევრად გამტარის გამტარობის ზონისათვის და, როგორც ვხედავთ, ეს დისპერსიის კანონი კვადრატული და იზოტროპულია.

2) განვიხილოთ სავალენტო ზონის ჭერის მახლობელი მდგომარეობები ($A > 0$)

$$\begin{aligned} E &= E_0 + 2|A| \left\{ \left[1 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 \right] + \left[1 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 \right] + \left[1 - \frac{1}{2}(k_z a)^2 \right] \right\} = \\ &= E_0 + 6|A| - |A|a^2(k_x^2 k_y^2 k_z^2) = (E_0 + 6|A|) - |A|a^2 k^2 \end{aligned} \quad (1.85)$$

თუ (1.85)-ში განვიხილავთ ისევ შემთხვევას, როცა $\vec{k} = 0$, მაშინ

$$E_V = E_0 + 6|A| \quad (1.86)$$

(1.86)-ის გათვალისწინებით (1.85)-ში, მივიღებთ დისპერსიის კანონის გამოსახულებას იდეალური ნახევრად გამტარის სავალენტო ზონისათვის

$$E = E_V - |A|a^2 k^2 \quad (1.87)$$

და გამტარობის ზონის მსგავსად. ეს დისპერსიის კანონიც კვადრატული და იზოტროპულია.

თუ განვიხილავთ იმპულსურ (ტალღური ვექტორის) სივრცეს, მაშინ $E(\vec{k})$ დამოკიდებულება განსაზღვრავს ამ სივრცეში მუდმივი ენერჯიის მქონე ზედაპირს

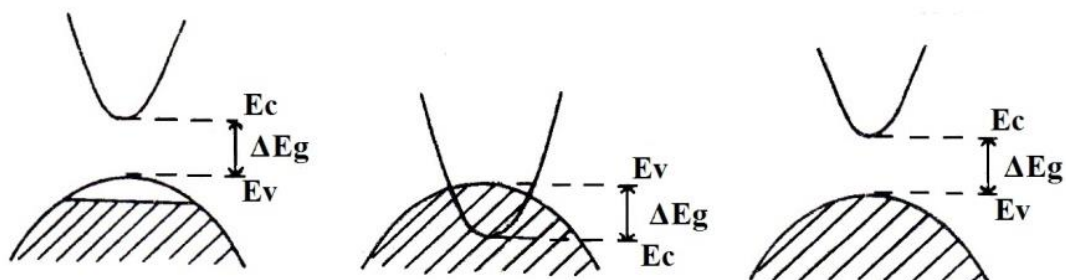
(იზოენერგეტიკულ ზედაპირს $E(\vec{k}) = const$) (1.84) და (1.87) გამოსახულებების თანახმად, გამტარობის ზონის ფსკერსა და სავალენტო ზონის ჭერთან ელექტრონების ენერგია არ არის დამოკიდებული \vec{k} ვექტორის მიმართულებაზე და ამდენად, იზოენერგეტიკული ზედაპირები ხასიათდებიან უმაღლესი სიმეტრიით – სფერული სიმეტრიით.

1.8. ზონების ელექტრონული მდგომარეობების შევსება.

მყარი სხეულების კლასიფიკაცია

შესავალში წარმოდგენილი იყო მყარი სხეულების კლასიფიკაცია, რომელიც ეყრდნობა ელექტროგამტარობის თავისებურებებს. მაგრამ გაცილებით გასაგები გახდება ლითონის, ნახევრად გამტარის და დიელექტრიკის თვისებათა განსხვავება თუ მათ კლასიფიკაციას საფუძვლად დაედება ზონების აგებულება და მათი ელექტრონული მდგომარეობების შევსება, რადგან, სწორედ ისინი განსაზღვრავენ ფიზიკური პროცესების უდიდეს უმრავლესობას. განხილვა ჩავატაროთ ტემპერატურის აბსოლუტურ ნულზე.

1) გამტარობისა და სავალენტო ზონებს შორის არსებობს ენერგეტიკული ღრეჩო $\Delta E_g > 0$, მაგრამ სავალენტო ზონა არ არის მთლიანად შევსებული ელექტრონებით (ნახ. 1.8,ა) – ნივთიერება წარმოადგენს ლითონს და მისი კარგი გამტარობა, აიხსნება იმით, რომ ზონაში თავისუფალი მდგომარეობების გამო, გარეშე ელექტრული ველის ზემოქმედებით ელექტრონებს საშუალება აქვთ შეიცვალოს ენერგია და მონაწილეობა მიიღოს მუხტის გადატანაში. ნაწილობრივ შევსებული სავალენტო ზონა გააჩნიათ ერთვალენტო პირველი ჯგუფის ელემენტებს – Li, Na, K, Rb, Cs და კეთილშობილ ლითონებს – Cu, Ag, Au .



გარეშე ზემოქმედებისას, მაგალითად, კრისტალის ξ დაძაბულობის ელექტრულ ველში მოთავსებისას, ელექტრონის აჩქარებასა და F გარეშე ძალას შორის კავშირი ჩაიწერება შემდეგი თანაფარდობით:

$$\bar{a} = \frac{d\bar{v}}{dt} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial P} \cdot \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial P} F \quad (1.90)$$

თუ (1.89) გამოსახულებას გავითვალისწინებთ (1.90)-ში მივიღებთ

$$\bar{a} = \frac{\partial^2 E}{\partial P^2} F \quad (1.91)$$

შევადართ (1.91) კლასიკური ნაწილაკისათვის არსებულ მოძრაობის განტოლებას

$$a = \frac{1}{m_0} F = -\frac{1}{m_0} e\xi \quad (1.92)$$

(1.91) და (1.92)-ის შედარებით ცხადი ხდება, რომ ამ გამოსახულებებში ერთმანეთს ემთხვევა კოეფიციენტების განზომილებები და სწორედ ამის გამო $\frac{\partial^2 E}{\partial P^2}$ კოეფიციენტმა მიიღო შებრუნებული ეფექტური მასის სახელწოდება

$$\left[\frac{\partial^2 E}{\partial P^2} \right] = \left[\frac{1}{m_0} \right] \quad (1.93)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial P^2} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{1}{m^*}, \quad (1.94)$$

სადაც $\frac{1}{m^*}$ არის შებრუნებული ეფექტური მასა.

აღსანიშნავია, რომ არავითარი ფიზიკური მსგავსება მასასა (კლასიკური გაგებით) და ეფექტურ მასას შორის არ არსებობს. ეფექტური მასა არ არის ინერტულობის ზომა და არ არის დაკავშირებული გრავიტაციულ ძალასთან. უფრო მეტიც, ეფექტური მასა, ნამდვილი მასისგან განსხვავებით, შეიძლება იყოს როგორც დადებითი, ასევე უარყოფითი სიდიდე. ეფექტური მასა არის კოეფიციენტი, რომელიც აკავშირებს ელექტრონის აჩქარებას მოქმედ გარეშე ძალასთან და მისი მეშვეობით ხდება ელექტრონზე კრისტალური პერიოდული ველის მოქმედების გავთვალისწინება.

კონკრეტული ამოცანის გადაწყვეტისას, ხშირად საჭირო ხდება აჩქარების კომპონენტების ცალ-ცალკე განხილვა

$$\left. \begin{aligned} a_x &= \frac{\partial^2 E}{\partial P_x^2} F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_y} F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_z} F_z \\ a_y &= \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_x} F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial P_y^2} F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_z} F_z \\ a_z &= \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_x} F_x + \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_y} F_y + \frac{\partial^2 E}{\partial P_z^2} F_z \end{aligned} \right\} \quad (1.95)$$

ვინაიდან კრისტალი, ზოგადად, ანიზოტროპული სისტემაა, ამიტომ აჩქარების ვექტორის მიმართულება არ ემთხვევა გარეშე ძალის ვექტორის მიმართულებას.

(1.95) გამოსახულებიდან გამომდინარე, შებრუნებული ეფექტური მასა მეორე რანგის ტენზორს წარმოადგენს კრისტალში

$$\{m_{ij}^{*-1}\} = \left\| \begin{array}{ccc} \frac{\partial^2 E}{\partial P_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_x \partial P_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_y \partial P_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_z \partial P_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial P_z^2} \end{array} \right\| = \left\| \begin{array}{ccc} m_{xx}^{*-1} & m_{xy}^{*-1} & m_{xz}^{*-1} \\ m_{yx}^{*-1} & m_{yy}^{*-1} & m_{yz}^{*-1} \\ m_{zx}^{*-1} & m_{zy}^{*-1} & m_{zz}^{*-1} \end{array} \right\| \quad (1.96)$$

ტენზორი (1.96) სიმეტრიულია მთავარი დიაგონალის მიმართ - $\frac{\partial^2 E}{\partial P_i \partial P_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial P_j \partial P_i}$,

ე.ი. $m_{ij}^{*-1} = m_{ji}^{*-1}$ ამიტომ, შეიძლება მოხდეს მატრიცის დიაგონალიზაცია და გვექნება

$$\{m^{*-1}\} = \left\| \begin{array}{ccc} m_{xx}^{*-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{yy}^{*-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{zz}^{*-1} \end{array} \right\| \quad (1.97)$$

რადგან არსებობს შებრუნებული ეფექტური მასის ტენზორი, მარტივად შეგვიძლია გადავიდეთ ეფექტური მასის ტენზორზეც (თუ შესაბამისი დეტერმინანტი ნულისგან განსხვავებულია)

$$\{m_{ij}^{*-1}\}^{-1} = \{m_{ij}^*\} = \left\| \begin{array}{ccc} m_1^* & 0 & 0 \\ 0 & m_2^* & 0 \\ 0 & 0 & m_3^* \end{array} \right\| \quad (1.98)$$

იდეალურ ნახევრად გამტარში ელექტრონის ეფექტური მასა m_n^* იზოტროპულია - $m_1^* = m_2^* = m_3^*$. ზემოთქმულიდან გამომდინარე

$$m_n^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (1.99)$$

ცხადია, კავშირი კრისტალში ელექტრონის სიჩქარესა და მის კვაზიიმპულსს შორის ხორციელდება ეფექტური მასის საშუალებით

$$\vec{V} = \frac{1}{m_n^*} \vec{P} \quad (1.100)$$

ეფექტური მასის შემოტანის შემდეგ უფრო მოხერხებული სახით ჩაიწერება დისპერსიის კანონიც. გამტარობის ზონისათვის მიღებული კვადრატული იზოტროპული კანონი

$$E = E_c + |A|a^2 k^2 \quad (1.101)$$

შევადართო თავისუფალი ელექტრონის დისპერსიის კანონს

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (1.102)$$

თუ გავითვალისწინებთ (1.101) და (1.102) ფორმულების მსგავსებას და თავისუფალი ელექტრონის მასას ელექტრონისათვის კრისტალში შევცვლით ეფექტური

მასით, მაშინ იდეალური ნახევრად გამტარის გამტარობის ზონისათვის დისპერსიის კანონი მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$E = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.103)$$

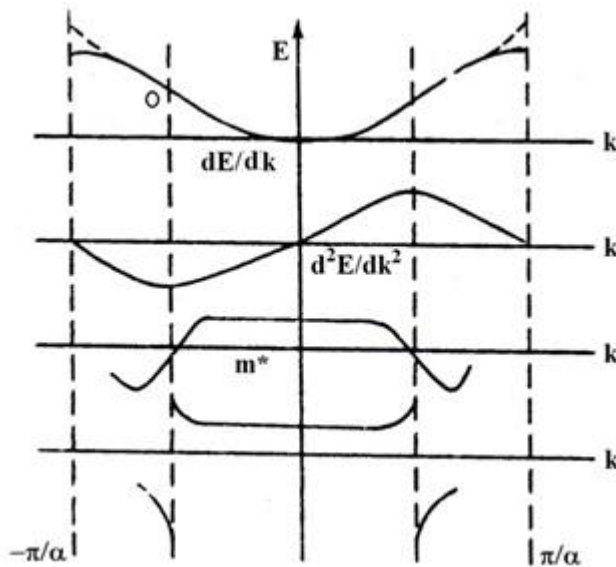
ანალოგიურად, სავალენტო ზონისათვის

$$E = E_V - |A|a^2 k^2 \quad (1.104)$$

და

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.105)$$

როგორც ვხედავთ, არსებობს უკუპროპორციული კავშირი გაცვლით ინტეგრალსა და m_n^* ეფექტურ მასას შორის. ვინაიდან გაცვლითი ინტეგრალი განსაზღვრავს დაშვებული ზონის სიგანეს, ამიტომ შეგვიძლია გავაკეთოთ მეტად მნიშვნელოვანი დასკვნა: რაც უფრო განიერია ზონა (ენერჯიის მიხედვით), მით მცირე იქნება ამ ზონაში ელექტრონის ეფექტური მასა.



ნახ. 1.9. ელექტრონის ეფექტური მასის თვისებების გრაფიკული ანალიზი

ზემოთ აღნიშნული იყო, რომ მუხტის გადამტანების ეფექტური მასა შეიძლება იყოს როგორც დადებითი, ასევე უარყოფითი. ელექტრონის ეფექტური მასა დაშვებული ზონის ფსკერთან დადებითია, ხოლო ჭერთან – უარყოფითი. საილუსტრაციოდ გრაფიკული ანალიზი ჩატარებულია ნახ. 1.9. -ზე.

1.10. ეფექტური მასის მეთოდი

როგორც ვიცით, ნახევრად გამტარებში ამა თუ იმ კონკრეტული ეფექტის ახსნა ძირითადად ხერხდება ელექტრონების ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის

საფუძველზე და, სწორედ ამიტომ, ასეთი დიდი ადგილი დაუთმეთ შრედინგერის განტოლების ამოხსნის მიახლოებით მეთოდებს.

ვინაღან ნახევრად გამტარის პრაქტიკული გამოყენება ყოველთვის დაკავშირებულია კრისტალზე გარკვეულ ზემოქმედებასთან, აუცილებელი ხდება ამ ზემოქმედების გავლენის გათვალისწინება მუხტის გადამტანების ენერგეტიკულ სპექტრზე. ფორმალურად ეს ნიშნავს, რომ ერთელექტრონიან მიახლოებაში ჩაწერილ შრედინგერის განტოლებას შეეცვალოს სახე ისეთნაირად, რომ მასში გათვალისწინებული იყოს გარეშე ზემოქმედებით გამოწვეული ცვლილებაც. ასეთ შემთხვევაში

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U(\vec{r}) + U'(\vec{r}) \right\} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.106)$$

$U'(\vec{r})$ წარმოადგენს ელექტრონის პოტენციური ენერჯიის იმ ნამატს, რომელიც გარეშე ზემოქმედებით არის განპირობებული. ზუსტად (1.106) განტოლების ამოხსნა შეუძლებელია, რადგან უცნობია კონკრეტულად $U(\vec{r})$ -ის სახე. ამ სიძნელის თავიდან ასაცილებლად მოვიქცეთ შემდეგნაირად: ვიცით, რომ ეფექტური მასა საშუალებას გვაძლევს გავითვალისწინოთ კრისტალის შიგა ძალების მოქმედება და, აქედან გამომდინარე, ეფექტური მასის გამოყენებით კრისტალში მყოფი ელექტრონის შრედინგერის განტოლებას მივცეთ ფორმალურად ისეთი სახე, როგორც ამ განტოლებას გააჩნია თავისუფალი ელექტრონისათვის

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right) \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E_0 \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.107)$$

მაშინ სხვადასხვა შემოფოტების პირობებში კრისტალში ელექტრონის ენერჯიის სპექტრის განსაზღვრისათვის უნდა გამოვიყენოთ გამოსახულება

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U'(\vec{r}) \right\} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (1.108)$$

რომელიც უკვე აღარ შეიცავს მესრის $U(\vec{r})$ პოტენციურ ენერჯიას. ამოცანის გადაწყვეტის ასეთი გზა ეფექტური მასის მეთოდის სახელწოდებითაა ცნობილი. იგი საკმაოდ ფართოდ გამოიყენება ნახევრად გამტარებზე სხვადასხვა გარეშე ზემოქმედებათა შესწავლისას.

1.11. კრისტალში ელექტრონის მოძრაობის თავისებურებანი

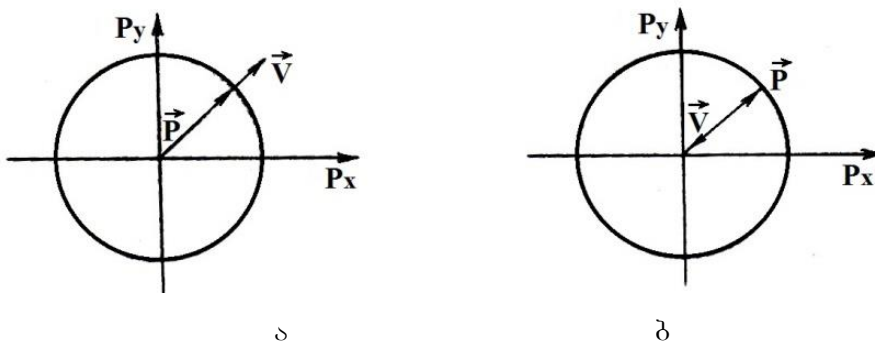
თუმცა კრისტალის იდეალური მესერი არ განაბნევს ელექტრონს, მესრის პოტენციური ველი მაინც ახდენს ზემოქმედებას ელექტრონის მოძრაობაზე. ამიტომ, ელექტრონის მოძრაობაზე გარეშე ძალების ზეგავლენის განხილვისას, გათვალისწინებულ უნდა იყოს შიგა ძალების მოქმედებაც.

განვიხილოთ იდეალური ნახევრად გამტარი. \vec{k}_0 -ით აღვნიშნოთ ენერგიის ექსტრემუმების შესაბამისი ტალღური ვექტორი (ნახ. 1.6; 1.7; k_x დერძის ნულოვანი წერტილი), ხოლო \vec{P}_0 -ით შესაბამისი კვაზიიმპულსი. მაშინ

$$\vec{V} = \frac{1}{\{m^*\}} (\vec{P} - \vec{P}_0), \quad (1.109)$$

სადაც $\{m^*\}$ ეფექტური მასის ტენზორია; $(\vec{P} - \vec{P}_0)$ - იზოენერგეტიკული ზედაპირის რადიუს-ვექტორი; ხოლო \vec{V} - ელექტრონის სიჩქარე, რომელიც გასაშუალებულია ენერგიის მიხედვით.

ცნობილია, რომ ამა თუ იმ სიდიდის გრადიენტი მიმართულია ამ სიდიდის იზოზედაპირის ნორმალის გასწვრივ. რადგანაც ელექტრონის მოძრაობის სიჩქარე კვაზიიმპულსის სივრცეში ენერგიის გრადიენტს წარმოადგენს ($\vec{V} = \frac{\partial E}{\partial \vec{P}}$), ამიტომ სიჩქარის ვექტორის მიმართულება ემთხვევა იზოენერგეტიკული ზედაპირის ნორმალის ვექტორის მიმართულებას. თუ გავითვალისწინებთ, რომ ელექტრონის ეფექტური მასა შეიძლება იყოს არა მარტო დადებითი, არამედ უარყოფითიც, ცხადი იქნება, რომ სიჩქარის ვექტორის მიმართულება შეიძლება აღმოჩნდეს რადიუს-ვექტორის როგორც პარალელური, ასევე ანტიპარალელური (ნახ. 1.10).



ნახ. 1.10. სიჩქარისა და იმპულსის ვექტორების მიმართულებები იზოენერგეტიკული ზედაპირის მიმართ, ა) $m_n^* > 0$, $\vec{V} \parallel \vec{P}$ ბ) $m_n^* < 0$, $\vec{V} \uparrow \downarrow \vec{P}$

ვინაიდან სფერული იზოენერგეტიკული ზედაპირის შემთხვევაში საქმე გვაქვს დისპერსიის კვადრატულ იზოტროპულ კანონთან, სიჩქარის (1.109) ფორმუ-

ლაში მარტივად შეგვიძლია გადავიდეთ კვაზიმპულსიდან ენერჯის მნიშვნელობაზე იდეალური ნახევრად გამტარისათვის

$$V = \frac{P-P_0}{m_n^*} = \sqrt{\frac{2(E-E_0)}{m_n^*}}. \quad (1.110)$$

იდეალური ნახევრად გამტარის მესერის მკაცრი პერიოდულობის გამო ელექტრონის მოძრაობას კრისტალი ხელს არ უშლის და ამიტომ, თუ გარეშე ძალა $\vec{F}_e = 0$, მაშინ მხოლოდ შიგა ძალების მოქმედებით ელექტრონის საშუალო სიჩქარის მნიშვნელობის ცვლილებას ადგილი არა აქვს და ამრიგად, იდეალურ პერიოდულ ველში აჩქარება არ ჩნდება, ე.ი. თუ გარეშე ძალა ნულის ტოლია, მაშინ მხოლოდ შიგა ძალის \vec{F}_i არსებობისას კვაზიმპულსი მუდმივი რჩება.

შიგა ძალების ძირითადი თვისება იმაში მდგომარეობს, რომ იგი პერიოდულია და მისი ცვლილების პერიოდი ემთხვევა მესერის პერიოდს

$$\vec{F}_i(\vec{r} + \vec{n}) = \vec{F}_i(\vec{r}), \quad (1.111)$$

\vec{n} ტრანსლაციის ვექტორია.

განვიხილოთ შემთხვევა როცა კრისტალზე მოქმედებს გარეშე ძალაც $\vec{F}_e \neq 0$. ამ დროს კვაზიმპულსიც აღარ რჩება მუდმივი - მისი ცვლილება გარეშე ძალით განისაზღვრება და რადგან კვაზიმპულსი არ არის მუდმივი ($\vec{P} \neq const$), ეს ნიშნავს, იცვლება მუხტის გადამტანების ენერჯიაც ($E \neq const$). ცხადია, ელექტრონის აჩქარება ამ შემთხვევაში გარეშე ძალის სიდიდით განისაზღვრება, მაგრამ, ამავე დროს, ის უშუალო კავშირშია ელექტრონის ეფექტურ მასასთანაც

$$\vec{a} = \frac{1}{\{m_n^*\}} \vec{F}_e \quad (1.112)$$

ზემოთქმულის საფუძველზე შეიძლება გაკეთდეს დასკვნა: - აჩქარებას განსაზღვრავს მხოლოდ გარეშე ძალა \vec{F}_e . შიგა ძალა არ ანიჭებს ელექტრონს აჩქარებას, მაგრამ ის ზეგავლენას ახდენს ელექტრონის მოძრაობაზე. სწორედ ამიტომ ელექტრონის დინამიური თვისებები კრისტალში განისაზღვრება ეფექტური m^* მასით და არა ნომინალური m_0 მასით.

იდეალურ ნახევრად გამტარში ტენზორული ეფექტური მასის ნაცვლად შესაძლებელია (1.9) სკალარული ეფექტური მასის გამოყენება ($m_1^* = m_2^* = m_3^* = m_n^*$) და თუ $m_n^* > 0$, მაშინ აჩქარების მიმართულება ემთხვევა გარეშე ძალის მიმართულებას, ხოლო თუ $m_n^* < 0$, მაშინ ელექტრონი გარეშე ძალის ზემოქმედებით შეიძენს აჩქარებას, რომლის მიმართულება ამ ძალის მიმართულების საპირისპიროა.

მაგალითისთვის განვიხილოთ კრისტალი ξ დაძაბულობის გარეშე ელექტრულ ველში. ამ შემთხვევაში აჩქარება

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}_e}{m_n^*} = \frac{-|e|\vec{\xi}}{m_n^*} = \begin{cases} \frac{-|e|\vec{\xi}}{m_n^*}, & \text{თუ } m_n^* > 0 \\ \frac{|e|\vec{\xi}}{m_n^*}, & \text{თუ } m_n^* < 0 \end{cases} \quad (1.113)$$

ენერგიის მაქსიმუმის მახლობლად, სადაც ელექტრონის ეფექტური მასა უარყოფითია ($m_n^* < 0$), ელექტრონი მოძრაობს ისე, თითქოს მას გააჩნია დადებითი მუხტი და დადებითი ეფექტური მასა.

თაზო II

მუხტის ბალამტანების ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის ელემენტები რეალურ ნახევრად გამტარში

2.1. ნახევრად გამტარის საკუთარი გამტარობა. ხვრელები

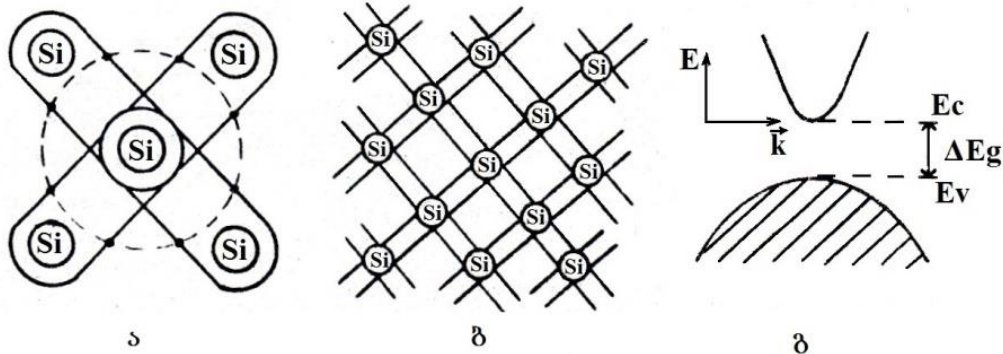
ნებისმიერი მარავალნაწილაკიანი სისტემის მდგრადობა და კერძოდ, კრისტალის მდგრადობაც განპირობებულია მის შემადგენელ ნაწილაკებს შორის არსებული ურთიერთქმედებით. კრისტალის მდგრადობა შეიძლება ავსხნათ იმ ქიმიური ბმების საშუალებით, რომელიც ხორციელდება კრისტალურ მესერში შემავალ ატომებს შორის. ვიცით, რომ არსებობს რამოდენიმე სახის ქიმიური ბმა. ნახევრად გამტარებში ძირითადად გვხვდება სამი სახის ბმა: კოვალენტური, იონური და შერეული -კოვალენტურ - იონური. ცხადია, ყველა შემთხვევაში ბმის განმასხვავებელი ნაწილაკი სავალენტო ელექტრონია. გამტარობის მოდელის ჩამოსაყალიბებლად მნიშვნელობა არ აქვს, თუ რომელ ბმას ავირჩევთ მაგალითის სახით.

სიმარტივისათვის ავიღოთ ელემენტარული ანუ ისეთი ნახევრად გამტარი, რომლის შემადგენლობაში ერთი ელემენტის ატომები შედიან (მაგ. Si). იგი მეოთხე ჯგუფის ელემენტია, $T = 0K$ ტემპერატურაზე შემდეგი ელექტრონული კონფიგურაციით: $1S^2 2S^2 2P^2 3S^2 3P^2$. სილიციუმის კრისტალის ჩამოყალიბებისას თითოეული ატომის 4 სავალენტო ელექტრონი ($3S^2 3P^2$) ქმნის ოთხ, სივრცულად ექვივალენტურ კავშირს, რის შედეგადაც თითოეული ატომი გარშემორტყმული აღმოჩნდა 4 უახლოესი მეზობელი ატომით (ნახ. 2.1, ა,ბ).

თუ ჩავთვლით, რომ კრისტალში დეფექტები არ არის, მაშინ აბსოლიტურ ნულ ტემპერატურაზე ყველა ბმა არსებობს, ანუ ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის თვალსაზრისით სავალენტო ზონა მთლიანად დაკავებულია ელექტრინებით, რადგან სწორედ აქ არის თავმოყრილი ბმაში მონაწილე სავალენტო ელექტრონების ენერგიები. გამტარობის ზონა მთლიანად თავისუფალია (ნახ. 2.1, გ). ცხადია, ასეთ შემთხვევაში კრისტალის ელექტროგამტარობა ნულის ტოლია, ვინაიდან არა გვაქვს მუხტის თავისუფალი გადამტანები.

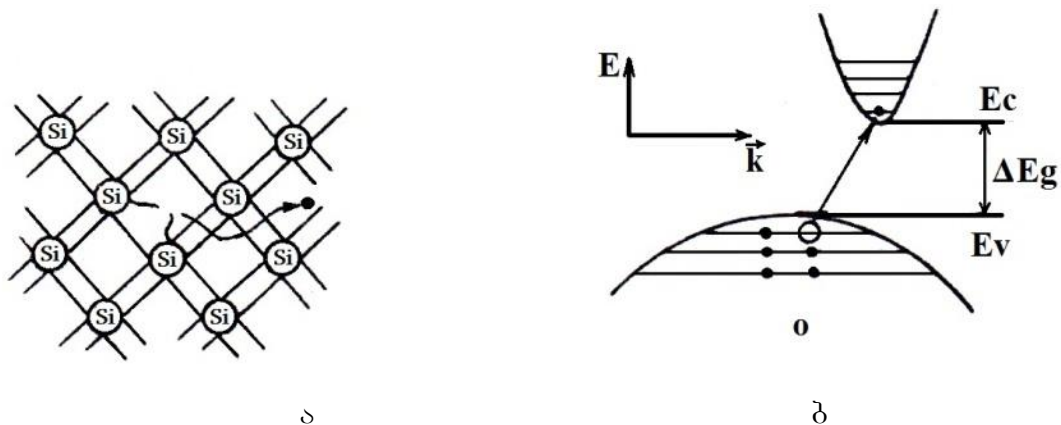
პირველი ნაბიჯი, რომელიც უნდა გადაიდგას ელექტრული გამტარობის აღსაძრავად არის ელექტრონის ბმიდან გამონთავისუფლება, რასაც სჭირდება გარკვეული ენერგია და სილიციუმის ზონური სტრუქტურიდან გამომდინარე თითოეული ელექტრონის გამოსათავისუფლებლად უნდა დაიხარჯოს 1,1ევ ენერგია; სწორედ ის ენერგია, რომლითაც გამტარობის ზონა დაცილებულია სავალენტოსაგან.

კრისტალისათვის ენერჯის მიწოდების გზას მნიშვნელობა არ აქვს. ეს შეიძლება მოხდეს კრისტალის გათბობით, ელექტრომაგნიტური გამოსხივებით, დამუხტული ნაწილაკებით, დაბომბვით ა.შ.



ნახ. 2.1. ა) სილიციუმის კრისტალში კოვალენტური კავშირების შექმნა;
 ბ) კრისტალური მესრის სიბრტყით გამოსახულება;
 გ) სილიციუმის სავალენტო ელექტრონების ენერგეტიკული ზონური დიაგრამა $T = 0K$ ტემპერატურაზე

ვთქვათ, ენერჯის მიწოდების შემდეგ მოხერხდა ბმის გაწყვეტა, მესერში გაჩნდა თავისუფალი ელექტრონი, ანუ ელექტრონი სავალენტო ზონიდან გამტარობის ზონაში იქნა გადაყვანილი (ნახ. 2.2.). მესერში დარჩა გაწყვეტილი ბმა. იონების დადებითი მუხტი ამ ლოკალურ ადგილას ელექტრონების მუხტით მთლიანად გაკომპენსირებული აღარ არის, ანუ სავალენტო ზონაში დარჩა შეუვსებელი ვაკანსია. ყველა კვანტური მდგომარეობა აღარ არის ელექტრონებით დაკავებული.



ნახ. 2.2. სავალენტო კავშირის გაწყვეტის მოდელი სიბრტყით გამოსახულებაში (ა) და ენერგეტიკულ ზონურ დიაგრამაში (ბ)

კრისტალზე წ დაძაბულობის ელექტრული ველის მოდების შემთხვევაში განთავისუფლებული (გამტარობის ზონაში გადასული) ელექტრონები შექმნიან დენს,

რომლის სიმკვრივე მათი კონცენტრაციითა და დრეიფული სიჩქარით განისაზღვრება

$$\vec{J}_n = en\vec{V}_{dn}, \quad (2.1)$$

n ელექტრონების კონცენტრაცია; \vec{V}_{dn} -ელექტრონების დრეიფული სიჩქარე (ელექტრული ველის ზეგავლენით განპირობებული მიმართული მოძრაობის სიჩქარე). იმისათვის, რომ დენის სიმკვრივე დავაკავშიროთ ელექტრული ველის დაძაბულობასთან (2.1), გამოსახულება გადავწეროთ შემდეგი სახით:

$$J_n = en \frac{V_{dn}}{\xi} \xi = en\mu_n \xi, \quad (2.2)$$

μ_n ელექტრონის ძვრადობაა. ეს არის ფიზიკური სიდიდე, რომელიც ახასიათებს ელექტრონების კრისტალში მოძრაობის უნარს და წარმოადგენს ელექტრონის დრეიფულ სიჩქარეს ერთეულოვან ელექტრულ ველში

$$\mu_n = \frac{V_{dn}}{\xi}. \quad (2.3)$$

(2.2) გამოსახულებიდან გამომდინარე ელექტროგამტარობა შემდეგნაირად განისაზღვრება:

$$\sigma_n = en\mu_n \quad (2.4)$$

ნახევრად გამტარის ელექტროგამტარობის თავისებურება იმაში გამოიხატება, რომ თავისუფალ ელექტრონებთან ერთად გამტარობაში მონაწილეობის საშუალება უჩნდებათ ბმულ ელექტრონებსაც. მართლაც, მას შემდეგ, რაც გაწყდა თუნდაც ერთი ბმა მესერში, ელექტრონს მეზობელი ბმიდან მიეცა საშუალება ელექტრული ველის მიმართულების საპირისპიროდ გადავიდეს და შეავსოს გაწყვეტილი ბმა. ვინაიდან ამ ორ ბმაში ელექტრონის მდგომარეობა სავსებით განურჩეველია, ნახტომის შესასრულებლად საკმარისი იქნება ელექტრული ველიდან მიღებული მცირე ენერგია, ე.ი. ამ ენერგიის ხარჯზე ელექტრონი სავალენტო ზონის ფარგლებში გადავა ერთი ენერგეტიკული დონიდან მეორე, შედარებით მაღლა განლაგებულ ენერგეტიკულ დონეზე.

ცხადია, ბმული ელექტრონების მთელი სიმრავლიდან გაწყვეტილი ბმების მეშვეობით მოძრაობას ერთდროულად შეძლებს მხოლოდ იმდენი ელექტრონი, რამდენი გაწყვეტილი ბმაცაა კრისტალში. ელექტრონის ბმების საშუალებით მოძრაობა შეიძლება განხილული იყოს როგორც გაწყვეტილი ბმის მოძრაობა საპირისპირო მიმართულებით. სწორედ ამიტომ მოსახერხებელია გამტარობაში ბმული ელექტრონებით გადატანილი უარყოფითი მუხტის წვლილის ნაცვლად ვილაპარაკოთ ვაკანსიის დადებითი მუხტის თითქოსდა საპირისპირო მიმართულებით მოძრაობაზე. გაწყვეტილ ბმას გაუკომპენსირებელი დადებითი მუხტით ან ვაკანტურ

მდგომარეობას სავალენტო ზონაში, რომელსაც მივაწერთ დადებით მუხტს, უწოდებენ ხვრელს. არ უნდა ავუროთ ერთმანეთში ხვრელი და იონი. მაგალითად, ელექტროლიტში იონიზირებული ატომი ელექტრული ველის გავლენით გადაადგილდება სივრცეში; კრისტალურ მესერში კი ატომები არ გადაადგილდებიან - ისინი სტაციონალურად არიან განლაგებული მესერის კვანძებში. ხვრელის მოძრაობა წარმოადგენს უძრავი ატომების მორიგეობით იონიზაციას. ამდენად, სხვადასხვა ფიზიკური პროცესის აღწერის გამარტივების მიზნით ხელსაყრელია ხვრელი ნაწილაკის სახით განვიხილოთ. მაშინ (2.1)-(2.4) ფორმულების მსგავსად შეგვიძლია ჩავწეროთ გამოსახულებები ხვრელური გამტარობისათვის

$$\vec{J}_p = ep\vec{V}_{dp}; \quad (2.5)$$

$$J_p = ep\mu_p\xi; \quad (2.6)$$

$$\sigma_p = ep\mu_p. \quad (2.7)$$

აქ p ხვრელების კონცენტრაციაა; μ_p -მათი ძვრადობა.

როგორც განხილულიდან გამომდინარეობს, თუ კრისტალი არ შეიცავს დეფექტს, მაშინ თავისუფალი ელექტრონების და გაწყვეტილი ბმების ანუ ხვრელების რაოდენობა ყოველთვის ერთმანეთს უტოლდება. ისეთ ნახევრად გამტარს, რომელშიც დაცულია პირობა $n = p$, ეწოდება საკუთარი ნახევრად გამტარი, ხოლო მის გამტარობას - საკუთარი გამტარობა, რომლის სიდიდე გამოითვლება შემდეგი ფორმულით:

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_n + \sigma_p = en\mu_n + ep\mu_p = e(n\mu_n + p\mu_p) = \\ &= e\mu_n(n + bp) = en\mu_n(1 + b) \end{aligned} \quad (2.8)$$

სადაც b -ით აღნიშნულია ხვრელებისა და ელექტრონების ძვრადობების ფარდობა

$$b = \frac{\mu_p}{\mu_n}. \quad (2.9)$$

ხვრელის ცნების შემოტანის შემდეგ შესაძლებელია საბოლოო სახით ჩაიწეროს დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონი იდეალური ნახევრად გამტარის არა მარტო გამტარობის, არამედ სავალენტო ზონისთვისაც, კერძოდ,

$$E = E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (2.10)$$

სადაც გათვალისწინებულია, რომ $m_p^* = -m_n^*$.

ხვრელთან დაკავშირებით შეიძლება ხაზი გაესვას შემდეგ მოსაზრებას:

1) ენერჯის მაქსიმუმის მახლობლობაში ხვრელი მოძრაობს როგორც დადებითი მუხტის მქონე ნაწილაკი დადებითი მასით, ენერჯიის მინიმუმის მახლობლად ხვრელის ეფექტური მასა გახდება უარყოფითი.

2) ხვრელის სიჩქარე – თავისუფალი მდომარეობის მოძრაობის სიჩქარეა. მაშასადამე, თუ ელექტრონი გამტარობის ზონის მინიმუმთან მოძრაობს ელექტრული ველის საპირისპირო მიმართულებით ($\vec{V}_{dn} = -\mu_n \vec{\xi}; \vec{V}_{dn} \uparrow \downarrow \vec{\xi}$), ხვრელი სავალენტო ზონის მაქსიმუმთან იმოძრაებს ელექტრული ველის მიმართულებით ($\vec{V}_{dp} = \mu_p \vec{\xi}; \vec{V}_{dp} \uparrow \uparrow \vec{\xi}$).

3) ხვრელური გამტარობის შემოდება მაშინ არის გამართლებული, თუ საქმე გვაქვს ნახევარზე მეტად შევსებულ ზონაში ბმული ელექტრონებით განპირობებულ გამტარობასთან. ამდენად, ხვრელის თვისებები მთლიანად განისაზღვრება სავალენტო ზონის ელექტრონის თვისებებით, ოდონდ მათი (ხვრელების) კონცენტრაცია ყოველთვის ზონაში ვაკანსიების კონცენტრაციის ტოლია.

2.2 ბრილუენის ზონები

იდეალური პერიოდული კრისტალური მესრის განხილვისას მის შემადგენელ ნაწილაკებს შორის მხოლოდ ძირითადი ელემენტალური ურთიერთქმედებების გათვალისწინებით დავადგინეთ, რომ საკმარისია შევისწავლოთ $E(\vec{k})$ დამოკიდებულების სახე ტალღური ვექტორის მნიშვნელობათა პირველი არისათვის, რომელსაც ბრილუენის პირველი (დაყვანილი) ზონა ეწოდება

$$\left. \begin{aligned} -\frac{\pi}{a} \leq k_1 < \frac{\pi}{a} \\ -\frac{\pi\hbar}{2} \leq P_1 < \frac{\pi\hbar}{2} \end{aligned} \right\} \quad (2.11)$$

სადაც $i = x, y, z$.

ასეთი იდეალური ნახევრად გამტარისათვის ბრილუენის პირველი ზონის ფარგლებში $E(\vec{k})$ დამოკიდებულებას საკმაოდ მარტივი სახე აქვს და ორივე ზონის (სავალენტო და გამტარობის ზონების) ექსტრემუმები განლაგებულია ბრილუენის ზონის ცენტრში $\vec{k} = 0$ წერტილში. სწორედ ამიტომ, დისპერსიის კანონების განხილვისას ჩვენ შემოვიფარგლოთ $\vec{k} = 0$ წერტილის მახლობელი არით.

რეალურ კრისტალებში ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება უფრო რთული და მრავალფეროვანია და, აქედან გამომდინარე, ენერგეტიკული ზონების ექსტრემუმები ბრილუენის ზონის სხვადასხვა წერტილში შეიძლება განლაგდეს.

რეალურ ნახევრად გამტარში $E(\vec{k})$ დამოკიდებულების თავისებურებების განხილვისას აუცილებელია ჯერ განვიხილოთ ამ კრისტალების შესაბამისი ბრილუენის ზონების კონკრეტული სახე იმპულსურ სივრცეში. ბრილუენის ზონის

გეომეტრიული სახე იმპულსურ სივრცეში უშუალო კავშირშია ნახევრად გამტარის კრისტალურ სტრუქტურასთან და არსებობს მეთოდი, რომლის მეშვეობითაც შესაძლებელია ავაგოთ ნებისმიერი კრისტალის ბრილუენის ზონა. ბრილუენის ზონის ასაგებად პირველ რიგში, პირდაპირი მესრიდან უნდა გადავიდეთ შებრუნებული მესრის სივრცეში, ე.ი. თუ კრისტალი ხასიათდება $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$ მესრის მუდმივებით, მათი მეშვეობით უნდა მოიძებნოს შებრუნებული მესრის პარამეტრები $(\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3)$, რაც ხორციელდება შემდეგნაირად:

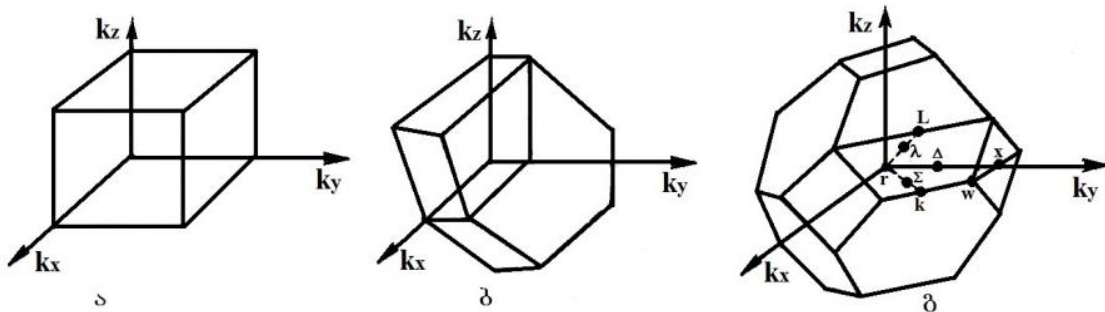
$$\left\{ \vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3}{V}; \vec{b}_2 = \frac{\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1}{V}; \vec{b}_3 = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{V} \right\}, \quad (2.12)$$

სადაც

$$V = \vec{a}_1 \cdot [\vec{a}_2, \vec{a}_3] \quad (2.13)$$

ელემენტარული უჯრედის მოცულობაა.

შებრუნებული მესრის დადგენის შემდეგ უნდა ავირჩიოთ მასში რომელიმე კვანძი. ეს კვანძი ვექტორებით შევაერთოთ ყველა უახლოეს მეზობელ კვანძთან, შემდგომ ამ ვექტორების შუა წერტილებზე ავაგოთ ვექტორთა მართობული სიბრტყეები და მათ მიერ შემოსაზღვრული იმპულსური სივრცის არე მოგვცემს ბრილუენის პირველ ზონას. ნახ. 2.3.-ზე წარმოდგენილია კუბური მესრის მქონე კრისტალების ბრილუენის პირველი ზონები.



ნახ. 2.3. ბრილუენის პირველი ზონა კუბური მესრისათვის:
 ა) მარტივი; ბ) მოცულობით ცენტრირებული; გ) წახნაგცენტრირებული

რეალური ნახევრად გამტარების საკმაოდ დიდი რაოდენობა (მაგ.: $Si, Ge, A^{III}B^V$ ტიპის ნახევრად გამტარები) ხასიათდებიან წახნაგცენტრირებული კუბური სტრუქტურით, რომლის შებრუნებული მესერი იქნება მოცულობაცენტრირებული კუბური მესერი. ბრილუენის ზონის ასაგებად ავირჩიოთ ამ კუბის ცენტრში განლაგებული კვანძი. მას უახლოეს მეზობლად აქვს 14 კვანძი, მათგან 8 განლაგებულია კუბის წვეროებში, ხოლო 6 – მეზობელი კუბების ცენტრებში. ამდენად, ამ მეზობლებთან შემაერთებელი ვექტორების შუა წერტილებზე აიგება 14 სიბრტყე, რომელთა გადაკვეთა იმპულსურ სივრცეში მოგვცემს 8 ექვსკუთხედისა და 6 კვადრატისგან შემდგარ წაკვეთილ ოქტაედრს ნახ. 2.3,გ და სწორედ იგი წარმოად-

გენს წახნაგცენტრირებული კუბური მესრის შესაბამის ბრილუენის პირველ ზონას. აღმოჩნდა, რომ $E(\vec{k})$ დამოკიდებულების ექსტრემალური მნიშვნელობები ბრილუენის ზონის მხოლოდ მაღალი სიმეტრიის წერტილებში გვხვდება. განვიხილოთ წაკვეთილი ოქტაედრის (ნახ. 2.3,გ) მაღალი სიმეტრიის წერტილები და ღერძები.

ყველაზე მაღალი სიმეტრიის წერტილია ბრილუენის ზონის ცენტრი $\Gamma\{000\}$ წერტილი. ცხადია, ასეთი წერტილი ერთია ზონაში ($M = 1$), სიმეტრიის თვალსაზრისით შემდგომ უნდა გამოიყოს $\Delta\{100\}$ ღერძი (ბრილუენის ზონის ცენტრის კვადრატის ცენტრთან, X წერტილთან შემაერთებული ღერძი). ვინაიდან წაკვეთილი ოქტაედრი შეიცავს 6 კვადრატს, ამიტომ Δ ღერძების რაოდენობაც 6-ის ტოლია - $[100], [010], [001], [\bar{1}00], [0\bar{1}0], [00\bar{1}]$. $\lambda\{111\}$ ღერძი აერთებს Γ წერტილს ექვსკუთხედის ცენტრთან, L წერტილთან. ამ შემთხვევაში $M = 8$ - $[111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}1], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$. $\Sigma\{110\}$ ღერძი Γ წერტილს აერთებს ექვსკუთხედის წიბოს ცენტრთან, K წერტილთან. $M = 12$ - $[110], [101], [011], [\bar{1}10], [1\bar{1}0], [\bar{1}01], [10\bar{1}], [0\bar{1}1], [01\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}0], [\bar{1}0\bar{1}], [0\bar{1}\bar{1}]$. უნდა აღინიშნოს, რომ ამ ღერძის სიმეტრია შედარებით დაბალია და ამიტომ Σ ღერძის წერტილებში ზონის ექსტრემუმი იშვიათად გვხვდება.

2.3. ეფექტური მასის ანიზოტროპია. დისპერსიის კვადრატული ანიზოტროპული კანონი

იდეალური ნახევრად გამტარისათვის შრედიზგერის განტოლების ჩაწერისა და ამოხსნისას ჩვენ ვამახვილებდით ყურადღებას მხოლოდ იმ ძირითად ურთიერთქმედებაზე (კულონურ ურთიერთქმედებაზე), რომელიც არსებობს კრისტალის შემადგენელ ნაწილაკებს შორის. ასეთი გამარტივებული მიდგომით, და თანაც მესრის პერიოდულობის იდეალურობიდან გამომდინარე, მუხტის გადამტანების ენერგეტიკული სპექტრისათვის საკმაოდ მარტივი სურათი მივიღეთ – გამტარობისა და სავალენტო ზონებს აქვთ პარაბოლური სახე, რომელთა ენერგიების ექსტრემალური მნიშვნელობები განლაგებულია ბრილუენის ზონის ცენტრში. ზონის სფერული სიმეტრიის გამო ელექტრონისა და ხვრელის ეფექტური მასები იზოტროპულია.

თუმცა რეალურ კრისტალებში ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება მნიშვნელოვნად რთულია, და ამდენად, რთულდება სავალენტო და გამტარობის ზონების აგებულებაც, ზონების ექსტრემუმები შეიძლება განლაგდნენ არა მარტო ბრილუენის ზონის ცენტრში ($\vec{k} = 0$), არამედ სხვა მაღალი სიმეტრიის წერტილებშიც ($\vec{k}_0 = 0$), მაგრამ აქაც ზოგიერთ ზონას შეიძლება გააჩნდეს სფერული

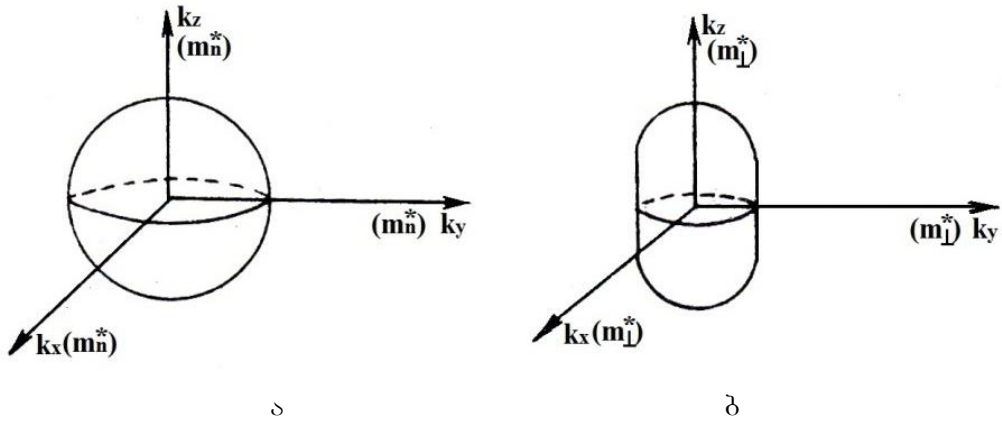
სიმეტრია. ასეთი ზონებისათვის სამართლიანი დარჩება დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონი

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}{2m^*} \quad (2.14)$$

ზოგადად, როგორც ელექტრონის, ასევე ხვრელის ეფექტური მასა სხვადასხვა მიმართულებით შეიძლება იყოს სხვადასხვა. ეფექტური მასის ანიზოტროპულობიდან გამომდინარე, საქმე გვექნება დისპერსიის კვადრატულ ანიზოტროპულ კანონთან

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\vec{k}_x - \vec{k}_{0x})^2}{m_1^*} + \frac{(\vec{k}_y - \vec{k}_{0y})^2}{m_2^*} + \frac{(\vec{k}_z - \vec{k}_{0z})^2}{m_3^*} \right]. \quad (2.15)$$

თუ შემოვიფარგლებით კუბური სიმეტრიის კრისტალების განხილვით, გამტარობის ზონისათვის იზოენერგეტიკულ ზედაპირს აქვს სფერული ან ბრუნვითი ელიფსოიდის ფორმა (ნახ. 2.4.)



ნახ. 2.4. გამტარობის ზონის იზოენერგეტიკული ზედაპირები
 ა) სფერული; ბ) ბრუნვითი ელიფსოიდი

ბრუნვითი ელიფსოიდის შემთხვევაში ელიფსის ღერძის გასწვრივ ეფექტური მასის მნიშვნელობა $m_3^* = m_{||}^*$ განსხვავდება დანარჩენი ორი ღერძის შესაბამისი $m_1^* = m_2^* = m_{\perp}^*$ მასების მნიშვნელობებისგან. ამდენად, დისპერსიის კანონი ჩაიწერება ასე:

$$E(\vec{k}) = E_C + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\vec{k}_x - \vec{k}_{0x})^2 + (\vec{k}_y - \vec{k}_{0y})^2}{m_{\perp}^*} + \frac{(\vec{k}_z - \vec{k}_{0z})^2}{m_{||}^*} \right]. \quad (2.16)$$

სწორად, ეფექტური მასის ანიზოტროპიის მიუხედავად, მოსახერხებელია გამტარობაში მონაწილე ელექტრონი დახასიათდეს ერთი, გასაშუალებული ეფექტური მასით

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{m_{\perp}^*} + \frac{1}{m_{||}^*} \right) \quad (2.17)$$

სავალენტო ზონის დისპერსიის კანონები განხილული იქნება შემდეგ პარაგრაფში.

2.4. სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედება. სავალენტო ზონის მაქსიმუმის აგებულება

კრისტალის შემაღლებულ ნაწილაკებს შორის რთული ხასიათის ურთიერთქმედება, ძირითადი – კულონური ურთიერთქმედების გარდა, შეიცავს მრავალ ნაზ ურთიერთქმედებასაც. მათ შორის მუხტის გადამტანების ენერგეტიკული სპექტრის თვალსაზრისით მნიშვნელოვანი როლი განეკუთნება ე.წ. სპინ-ორბიტულ ურთიერთქმედებას. ამ ურთიერთქმედების არსში გასარკვევად გავიხსენოთ, თუ რა ზეგავლენას ახდენს მაგნიტური ველი ელექტრონის ენერგეტიკულ მდგომარეობაზე. როგორც ვიცით, პაულის აკრძალვის პრინციპის თანახმად, თითოეულ ენერგეტიკულ დონეზე შეიძლება განლაგდეს ორი ელექტრონი საპირისპირო პროექციის სპინებით. თუ ეს ელექტრონები აღმოჩნდებიან გარეშე მაგნიტურ ველში, მაშინ ამ მაგნიტური ველის ზემოქმედება განსხვავებული სპინების მქონე ელექტრონებზე სხვადასხვა იქნება და ამიტომ მაგნიტურ ველში ენერგეტიკული დონე გაიხლიჩება ორად.

კრისტალში ყოველთვის არსებობს მაგნიტური მიკრო ველები, რომლებიც იქმნებიან ატომში ელექტრონების ორბიტული მოძრაობით. ეს მაგნიტური მიკრო ველები ზეგავლენას ახდენენ რა ელექტრონებზე, სხვადასხვანაირად მოქმედებენ სხვადასხვა სპინის პროექციის მქონე მუხტის გადამტანებზე. ელექტრონის სპინური მომენტისა და ორბიტული ბრუნვით განპირობებული მაგნიტური ველის ურთიერთქმედება ცნობილია სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების სახელწოდებით. ეს ურთიერთქმედება გარკვეული პოტენციური ენერგიით ხასიათდება და მას სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების ენერგია ეწოდება.

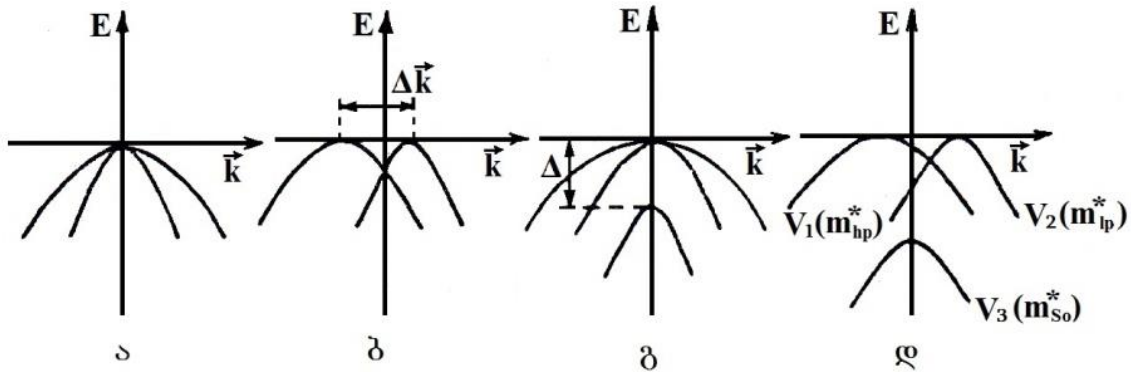
იზოლირებულ ატომში აღნიშნული ენერგიის დათვლა საკმაოდ მარტივად შეიძლება

$$E_{so} = \frac{Ze^2}{2c^2 m_0^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L}. \quad (2.18)$$

რა თქმა უნდა ეს გამოსახულება, რომელიც სამართლიანია ატომისათვის, არ გვაძლევს ზუსტ რაოდენობრივ შედეგს კრისტალისათვის, მაგრამ ელექტრონის ნომინალური m_0 მასის ნაცვლად ეფექტური მასის გამოყენებით შეიძლება ხარისხობრივად შევაფასოთ სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების ენერგია კრისტალისათვისაც. (2.18) გამოსახულებიდან ჩანს, რომ რაც უფრო მძიმეა ელემენტი და რაც უფრო მცირეა ამ კრისტალში ელექტრონის ეფექტური მასა, მით უფრო მნიშვნელოვნად იქნება გამოხატული სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედება.

ზონური სტრუქტურის ცვლილების თვალსაზრისით შეგვიერთო სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების ორ ზეგავლენაზე. პირველი იმაში მდგომარეობს, რომ

სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედება განაპირობებს ზონების წანაცვლებას ტალღური ვექტორის მიხედვით ნახ. 2.5,ა,ბ, მაგრამ ეს წანაცვლება იმდენად მცირეა და ეს ეფექტი – იმდენად სუსტი, რომ მას, როგორც წესი, არ ითვალისწინებენ და თვლიან, რომ $\Delta\vec{k} \rightarrow 0$, სამაგიეროდ უაღრესად მნიშვნელოვანია მეორე ზემოქმედება – ენერჯიის მიხედვით ზონების წანაცვლება ნახ. 2.5,ა,გ.



ნახ. 2.5. სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების ზეგავლენა სავალენტო ზონის მაქსიმუმის აგებულებაზე ($\alpha-E_{so} = 0$)

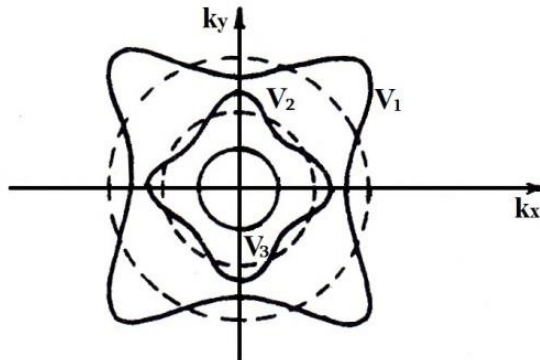
განვიხილოთ რეალური ნახევრად გამტარის სავალენტო ზონის მაქსიმუმის აგებულება Γ წერტილში ნახ. 2.5,დ. მრავალ რეალურ ნახევრად გამტარში სავალენტო ზონის აბსოლუტური მაქსიმუმი სამჯერ გადაგვარებული მდგომარეობაა (სპინის გაუთვალისწინებლად). თუ გავითვალისწინებთ სპინ-ორბიტულ ურთიერთქმედებას აღმოჩნდება, რომ ეს სამჯერ გადაგვარებული მდგომარეობა იხლიჩება ორად: – ორჯერ გადაგვარებულ და გადაუგვარებელ მდგომარეობად. ამ მდგომარეობებს შორის ენერგეტიკული ღრეჩო Δ განისაზღვრება სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების ენერჯიით.

როგორც ნახ. 2.5,დ-დან ჩანს, სავალენტო ზონის მაქსიმუმი შედგება სამი ქვეზონისაგან V_1 , V_2 და V_3 და თითოეულ ქვეზონაში ხვრელს ექნება საკუთარი ეფექტური მასა – m_{hp}^* , m_{lp}^* და m_{so}^* .

V_1 ზონას მძიმე ხვრელების ქვეზონას უწოდებენ, ვინაიდან სწორედ ამ ზონაში ხვრელების ეფექტური მასა მაქსიმალურია, ხოლო V_2 -ს მსუბუქი ხვრელების ქვეზონა ეწოდება - აქ მასა შედარებით მცირეა. V_3 -ს უწოდებენ სპინ-ორბიტული ხვრელების ქვეზონას, ვინაიდან იგი სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედებით არის გამოყოფილი.

რაც შეეხება სავალენტო ზონის იზოენერგეტიკულ ზედაპირებს, V_3 ქვეზონა სფერული სიმეტრიით ხასიათდება. V_1 და V_2 ქვეზონების შესაბამისი იზოენერგეტი-

კული ზედაპირები დეფორმირებულია (ამის მიზეზი გადაგვარების არსებობაა Γ წერტილში, ნახ. 2.6). მათ გოფირებულ ზედაპირებს უწოდებენ.



ნახ. 2.6. Γ წერტილის მახლობლად სავალენტო ზონის იზოენერგეტიკული ზედაპირების ჭრილი

მიუხედავად იმისა, რომ ეს ქვეზონები არ ხასიათდებიან მკაცრი სფერული სიმეტრიით, მიიჩნევენ, რომ V_1 და V_2 ქვეზონებში, ისევე როგორც V_3 -ში, ეფექტური მასა იზოტროპულია, აქედან გამომდინარე, საქმე გვექნება დისპერსიის იზოტროპულ კანონთან სამივე ქვეზონისათვის

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hp}^*}. \quad (2.19)$$

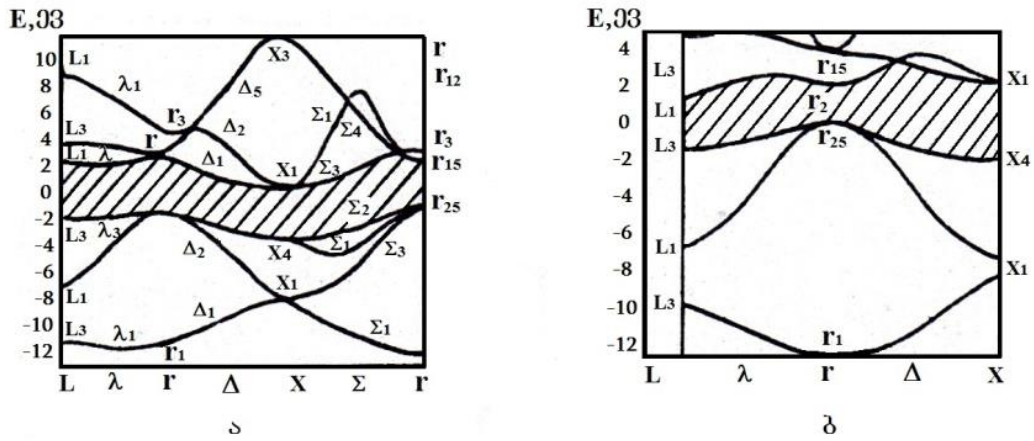
$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lp}^*}. \quad (2.20)$$

$$E = E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}^*}. \quad (2.21)$$

ამ გამოსახულებაში ნიშანი “მინუსი” განპირობებულია იმით, რომ ენერჯიის ათვლა წარმოებს სავალენტო ზონის ჭერიდან.

2.5. რეალური ნახევრად გამტარების ზონური აგებულების მაგალითები

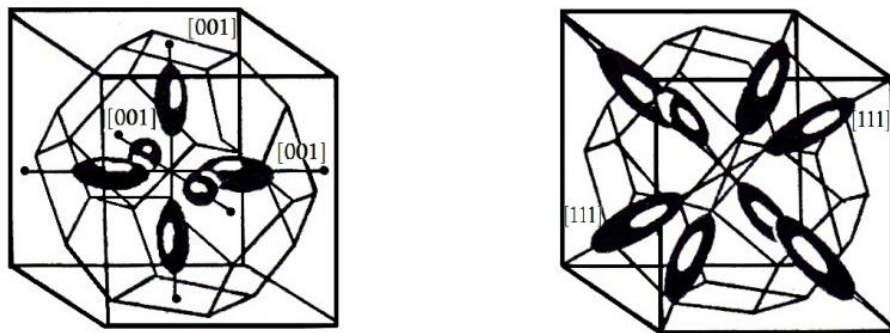
გავეცნოთ რეალური ნახევრად გამტარების ენერგეტიკულ ზონურ სტრუქტურას. ამ მიზნით, აქ წარმოდგენილი იქნება დღეისათვის უკეთ შესწავლილი და ტექნიკაში ფართოდ გამოყენებული ელემენტარული ნახევრად გამტარების Ge და Si -ის, ხოლო შენაერთებიდან $A^{III}B^V$ ტიპის ნახევრად გამტარების ზონური სტრუქტურები (სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების გათვალისწინების გარეშე).



ნახ. 2.7. Si (ა) და Ge (ბ) ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურა

სილიციუმისა და გერმანიუმის ზონური სტრუქტურები მოყვანილია ნახ. 2.7-ზე. ორივე ნახევრად გამტარის სავალენტო ზონის აბსოლუტური მაქსიმუმი ბრიულენის ზონის ცენტრში $\Gamma(\vec{k} = 0)$ წერტილშია მოთავსებული, ხოლო გამტარობის ზონის აბსოლუტურ ექსტრემუმებს ტალღური ვექტორის ნულისაგან განსხვავებული მნიშვნელობები შეესაბამება. Si-ის აბსოლუტური მინიმუმი დევს Δ ღერძზე ბრიულენის ზონის შიგნით, ხოლო Ge-ის - ზონის კიდეზე $\{111\}$ მიმართულებით L წერტილში.

ორივე ნახევრად გამტარში გამტარობის ზონის აბსოლუტური მინიმუმის იზოენერგეტიკული ზედაპირი ბრუნვითი ელიფსოიდია (ნახ. 2.8). ექსტრემუმის ლოკალიზაციიდან გამომდინარე, სილიციუმის გამტარობის (თავისუფალი) ელექტრონები თანაბრად იქნებიან განაწილებული ექვს ელიფსოიდზე (ნახ. 2.8,ა), ხოლო გერმანიუმის - ოთხზე (თუმცა მინიმუმი დევს λ ღერძზე და ასეთი ღერძი რვაა, მაგრამ გვექნება მხოლოდ ოთხი სრული ელიფსოიდი), ვინაიდან L წერტილში განლაგებული თითოეული ელიფსოიდის მხოლოდ ნახევარი ეკუთვნის ბრიულენის პირველ ზონას (ნახ. 2.8,ბ).



ნახ. 2.8. Si (ა) და Ge (ბ) გამტარობის ზონის ექსტრემუმის იზოენერგეტიკული ზედაპირები

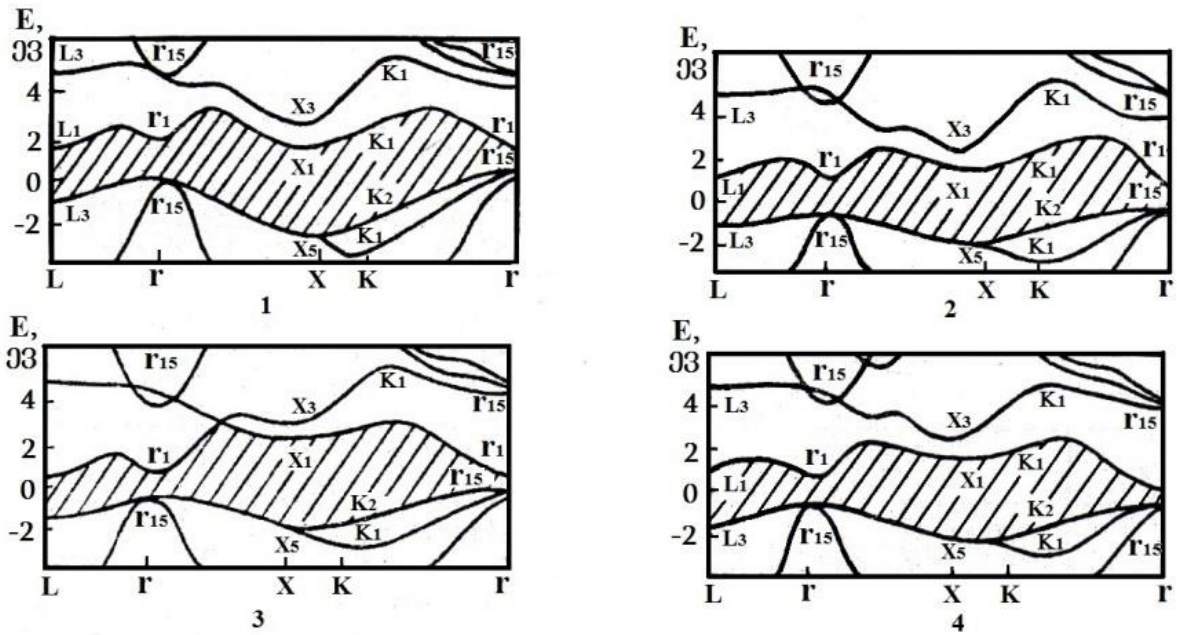
სილიციუმისა და გერმანიუმის ბრილუენის ზონის სხვადასხვა წერტილში ძირითადი ენერგეტიკული ღრეხობები, სავალენტო ზონის სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედების Δ და მუხტის თავისუფალი გადამტანების ეფექტური მასების მნიშვნელობანი თავმოყრილია ცხრილში 2.1.

ცხრილი 2.1

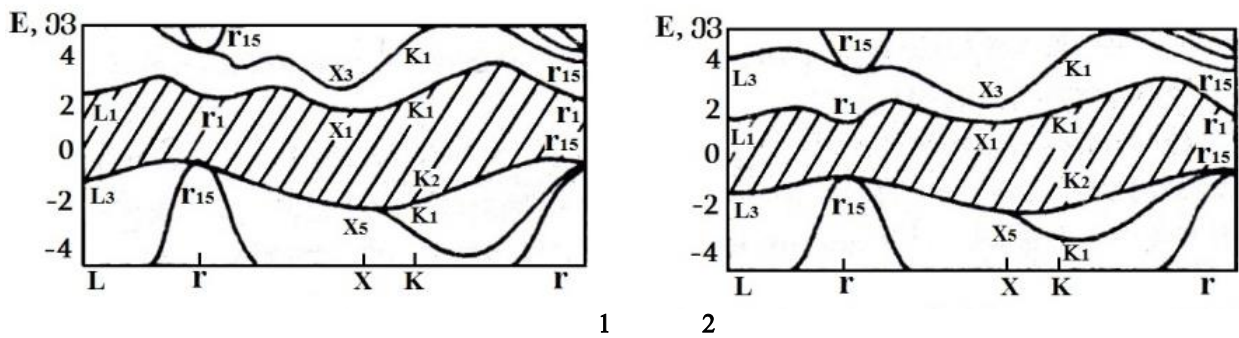
სილიციუმისა და გერმანიუმის ზონური სტრუქტურის ძირითადი პარამეტრები

E , ევ	<i>Si</i>		<i>Ge</i>	
	თეორია	ექსპერიმენტი	თეორია	ექსპერიმენტი
$\Gamma_2 - \Gamma_{25}$	3.3-3.8	3.8	0.9-1.2	0.89
$\Gamma_{15} - \Gamma_{25}$	2.8-3.4	3.4	2.8-3.1	2.98
$\Gamma_1 - \Gamma_{25}$	1.8-1.9	1.9	$\Delta E_g 0.7 - 0.9$	$\Delta E_g \frac{0.76(0K)}{0.67(300K)}$
$\Delta_1 - \Gamma_{25}$	$\Delta E_g 1.5 - 1.4$	$\Delta E_g \frac{1.17(0K)}{1.12(300K)}$		
$X_1 - \Gamma_{25}$			1.2-1.3	1.2
$L_1 - L_3$	2.9-3.2	3.2	1.9-2.0	2.0
$X_1 - X_4$	4.0-4.2	4.1	4.1-4.5	4.3
$\Delta(\Gamma_{25})$	0.044	0.046	0.29	0.296
$\frac{m_{ }^*}{m_0}(E_c)$		0.916		1.588
$\frac{m_{\perp}^*}{m_0}(E_c)$		0.191		0.81
$\frac{m_n^*}{m_0}(E_c)$		0.26		0.12
$\frac{m_n^*}{m_0}(r_2)$		0.16		0.04
$\frac{m_{hp}^*}{m_0}(E_c)$		0.56		0.33
$\frac{m_{lp}^*}{m_0}(E_c)$		0.18		0.042

ნახ. 2.9.–2.10.-ზე მოყვანილია $A^{III}B^V$ ტიპის ზოგიერთი შენაერთის ზონური სტრუქტურები. ყველა ამ ნახევრად გამტარის სავალენტო ზონის აბსოლუტური მაქსიმუმი (ისევე, როგორც სილიციუმსა და გერმანიუმში) ბრილუენის ზონის ცენტრში, Γ წერტილშია მოთავსებული.



ნახ. 2.9. პირდაპირზონიანი ნახევრად გამტარების -GaAs (1), GaSb (2), InSb (3), InP (4) ზონური სტრუქტურები



ნახ. 2.10. არაპირდაპირზონიანი ნახევრად გამტარების GaP (1) და AlSb (2) ზონური სტრუქტურები

გალიუმის არსენიდი, გალიუმისა და ინდიუმის ანთიმონიდები, ინდიუმის ფოსფიდი პირდაპირზონიან ნახევრად გამტარებს მიეკუთვნებიან, ე.ი. მათი გამტარობის ზონის აბსოლუტური მინიმუმი იმავე წერტილშია განლაგებული, სადაც სავალენტო ზონის აბსოლუტური მაქსიმუმი (Γ წერტილი). ამდენად, გამტარობის ზონის ექსტრემალური მდგომარეობა მხოლოდ ერთ მინიმუმს შეიცავს, თანაც ის სფერული სიმეტრიისაა. ზონური სტრუქტურის ძირითადი პარამეტრები მოყვანილია ცხრილში 2.2.

გალიუმის არსენიდისა და გალიუმის ანთიმონიდის ზონური სტრუქტურის თავისებურებებს შორის უნდა აღინიშნოს გამტარობის ზონის ორი ექსტრემუმის ენერგეტიკული სიახლოვე. GaAs-ში Γ_1 აბსოლუტური ექსტრემუმისაგან 0,36ევ-ით მაღლა დევს X_1 მინიმუმი, ხოლო GaSb-ში კიდევ უფრო ახლოს Γ_1 მინიმუმიდან,

0,08ევ-ის მაღლა განლაგებულია მინიმუმი L_1 . ეს გარემოება მნიშვნელოვან ზეგავლენას ახდენს ამ მასალების (განსაკუთრებით $GaSb$ -ის) ფიზიკურ თვისებებზე. საყურადღებოა აგრეთვე სავალენტო ზონის მნიშვნელოვანი გახლეჩა სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედებით გალიუმის ანტიმონიდში (0,8ევ), რომელიც აკრძალული ზონის სიგანეს უახლოვდება.

ცხრილი 2.2

$A^{III}B^V$ ტიპის ნახევრად გამტარების ზონური სტრუქტურის ძირითადი პარამეტრები (ევ).

1. თეორია 2. ექსპერიმენტი	<i>GaAs</i>	<i>GaSb</i>	<i>InSb</i>	<i>InP</i>	<i>GaP</i>	<i>AlSb</i>
$\Gamma_1^c - \Gamma_{15}^v$	1.4-1.7 $1.517\Delta E_g$	0.9-1.1 $0.813\Delta E_g$	0.4-0.5 $0.27\Delta E_g$	1.5-1.6 $1.416\Delta E_g$	2.7-2.9 2.8	1.9-2.4 2.1
$\Gamma_{15}^c - \Gamma_{15}^v$	4.5-4.6 4.6	3.5-4.4 4.0	3.8-4.1 3.7	4.6-4.7 4.4	4.7-5.3 4.9	4.1 3.9
$L_1^c - \Gamma_{15}^v$	1.7-2.0 2.0	1.0-1.2 1.16	1.3-1.5 1.3	1.9-2.0 1.8	2.5-2.7 -	1.5-2.1 -
$X_1^c - \Gamma_{15}^v$	1.8-1.9 1.9	1.2-1.3 1.38	1.7-2.5 -	2.3-2.4 2.1	2.2-2.3 $2.325\Delta E_g$	1.8-2.0 $1.65\Delta E_g$
$L_1^c - L_3^v$	2.6-2.9 2.5	2.0-2.2 1.8	1.9-2.1 1.9	2.8 3.1	3.4-3.6 3.6	2.8 2.9
$X_1^c - X_5^v$	4.2-4.8 4.6	3.9-4.1 4.3	3.5-4.4 4.0	4.2-4.8 4.2	4.6-4.9 5.1	3.9-4.2 4.2
$X_3^c - X_1^c$	0.3-0.6 0.4	0.4 0.37	0.4-0.5 0.5	0.3-0.5 0.3	0.2-0.4 0.2-0.3	0.4 0.4
$\Delta(\Gamma_{15}^v)$	0.34 0.341	0.8 0.749	0.81-0.82 0.803	0.18 -	0.10 -	0.76 0.75
$\frac{m_{n(E_c)}^*}{m_0}$	0.067	0.047	0.0155	0.077	0.34 0.28(⊥) 1.18(∥)	0.25(⊥) 1.36(∥)
$\frac{m_{hp}^*(E_c)}{m_0}$	0.5	0.39	0.5	0.2	0.5	0.4-0.9
$\frac{m_{ip}^*(E_c)}{m_0}$	0.12	0.053	0.015	0.053	0.13	0.12

გალიუმის ფოსფიდი და ალუმინის ანტიმონიდი არაპირდაპირზონიანი ნახევრად გამტარებია, მათი გამტარობის ზონის აბსოლუტური ექსტრემუმი ბრილუენის ზონის კიდეზე, X წერტილშია განლაგებული, თავისუფალი ელექტრონების ეფექტური მასა ანიზოტროპულია (იზოენერგეტიკული ზედაპირი ბრუნვითი ელიფსოიდია). აბსოლუტური მინიმუმის X_1 -ის თავზე დევს კიდევ ერთი მინიმუმი X_3 . გარკვეულ პირობებში შესაძლებელი ხდება თავისუფალი ელექტრონების პირდაპირი შიდაზონური გადასვლები $X_1 \rightarrow X_3$.

2.6. დეფექტები ნახევრად გამტარებში. მინარეული გამტარობა

რეალურ კრისტალში, იდეალურისგან განსხვავებით, მესრის იდეალური პერიოდულობა დაცული არ არის. იდეალური პერიოდულობიდან გადახრას შეიძლება მრავალი მიზეზი განაპირობებდეს და ასეთი ნებისმიერი გადახრა განიხილება როგორც კრისტალური მესრის დეფექტი. არსებობს დეფექტების კლასიფიკაცია, რომელიც ეყრდნობა დეფექტის განზომილებას (n) და აქედან გამომდინარე, გვხვდება დეფექტების ოთხი კლასი:

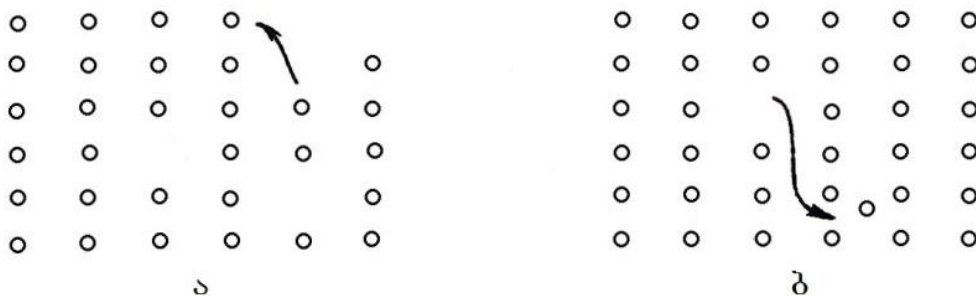
1. $n = 3$ – მაკროსკოპული, სივრცული დეფექტები (დახურული და ღია ფორები, ბზარები, განსხვავებული ფაზის ჩანართები).

2. $n = 2$ – ბრტყელი დეფექტები (კრისტალისა და მარცვლების საზღვრები).

3. $n = 1$ – ხაზოვანი დეფექტები. ხაზოვანი დეფექტია დისლოკაცია ანუ წირი, რომლის გასწვრივ ან მახლობლად დარღვეულია ატომური სიბრტყეების კანონზომიერი განლაგება. დისლოკაციები მნიშვნელოვან ზეგავლენას ახდენენ ნახევრად გამტარების ფიზიკურ, განსაკუთრებით მექანიკურ თვისებებზე.

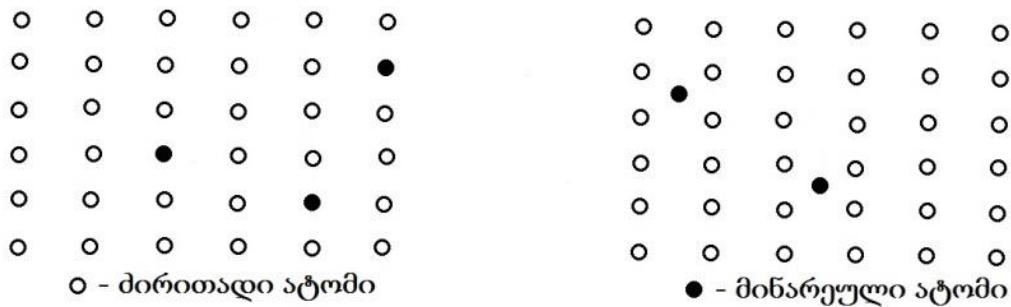
4. $n = 0$ – წერტილოვანი დეფექტები (ვაკანსიები, კვანძთაშორისი ატომები, მინარეული ატომები).

თუ მესერში კვანძი არ არის დაკავებული იონით (ატომით), მაშინ ასეთ დეფექტს ვაკანსია ეწოდება. ვაკანსია, ისევე როგორც კვანძთაშორისი ატომი, განაპირობებს ლოკალური ელექტრული ველის აღძვრას. იმის და მიხედვით, თუ სად წავიდა კვანძიდან ამოვარდნილი ატომი განასხვავებენ ორი ტიპის ვაკანსიას: შოტკისა და ფრენკელის ვაკანსიას. თუ კვანძიდან ამოვარდნილი ატომი გავიდა კრისტალის ან მარცვლის საზღვარზე ამბობენ, რომ საქმე გვაქვს შოტკის ვაკანსიასთან (ნახ. 2.11,ა). ფრენკელის ვაკანსიის შემთხვევაში კვანძიდან ამოვარდნილი ატომი განლაგდება კვანძებს შორის (ნახ. 2.11,ბ).



ნახ. 2.11. ვაკანსიები კრისტალში
 ა) შოტკის ვაკანსიები ბ) ფრენკელის ვაკანსიები

წერტილოვან დეფექტებს მიეკუთვნება მინარეული ატომიც. მესერში განლაგების მიხედვით შეიძლება ვილაპარაკოთ ორი სახის მინარეულ ატომზე: ჩანაცვლებულ და ჩანერგილ მინარეულ ატომზე. ჩანაცვლებული ნიშნავს, რომ მინარეულმა ატომმა შეცვალა კვანძში ძირითადი ატომი (ნახ. 2.12,ა), ხოლო ჩანერგია იმ შემთხვევაში, თუ მინარეული ატომი განლაგდება კვანძთა შორის (ნახ. 2.12,ბ). ნახევრად გამტარების ფიზიკის თვალსაზრისით უფრო მნიშვნელოვანია ჩანაცვლებული მინარეული ატომი.



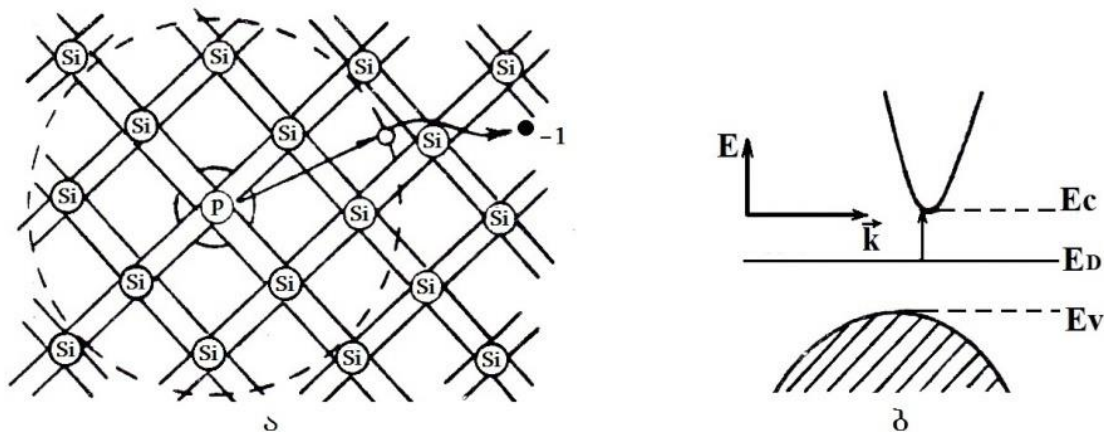
ნახ. 2.12. კრისტალში მინარეული ატომების შესაძლო განლაგებანი
 ა) ჩანაცვლებული მინარეული ატომი; ბ) ჩანერგილი მინარეული ატომი

ცხადია, რომ მესერში მინარეული ატომების არსებობა ზეგავლენას ახდენს კრისტალურ ველზე. ამავე დროს, ენერგეტიკული სპექტრის კონკრეტული ცვლილებების ხასიათი დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორია მინარეული ატომების ფარდობითი რიცხვი. მინარეულების მცირე კონცენტრაციისას ($n_{\text{ინ}} \ll n_{\text{ათ}}$) მინარეული ატომის ზეგავლენა კრისტალურ ველზე გამომჟღავნდება მხოლოდ მის მახლობლად (მინარეული ატომის მოქმედება ლოკალიზებულია). მინარეულების ელექტრონული გარსები არ გადაფარავენ ერთმანეთს და ამიტომ მათ შენარჩუნებული ექნებათ ატომური დისკრეტული ხასიათი. მაშასადამე, ენერგეტიკულ სპექტრში, დაშვებულ ზონებთან ერთად, გაჩნდება მინარეულ დონეთა სისტემა.

შესაძლებელია აგრეთვე, კრისტალში შეყვანილი იყოს მინარეულების დიდი რაოდენობა ($n_{\text{ინ}} \approx n_{\text{ათ}}$). ამ შემთხვევაში მინარეული ატომები განლაგდებიან რასაკმაოდ ახლოს ერთმანეთთან, მათი ენერგეტიკული გარსების გადაფარვის გამო, შექმნიან ზონებს - ე.წ. მინარეულ ზონებს, ე.ი. ენერგეტიკულ სპექტრში დაშვებული ზონების მახლობლად განლაგდებიან მინარეული ზონები.

გამტარობის თვალსაზრისით მინარევი მაშინ არის საინტერესო, როდესაც მისი ვალენტობა განსხვავდება ძირითადი ატომის ვალენტობისაგან. ვალენტობის მიხედვით მინარეულები შეიძლება ორ ჯგუფად დავეყოთ: 1. ის მინარეულები, რომელთა ვალენტობა ± 1 -ით განსხვავდება ძირითადი ატომის ვალენტობისგან ($\Delta v = \pm 1$) და 2. განსხვავება ვალენტობაში შეადგენს ± 2 -ს ან მეტს ($\Delta v \geq \pm 2$).

შედარებით უფრო კარგად არის შესწავლილი და ფართოდ გამოიყენება ის მინარევეები, რომელთა ვალენტობა მხოლოდ ერთით განსხვავდება ძირითადი ატომის ვალენტობისგან. განვიხილოთ ისეთი მინარევი, რომლის ვალენტობა ერთით ჭარბობს ძირითადი ატომის ვალენტობას. ასეთ მინარევს დონორული მინარევი ეწოდება, ვინაიდან, როდესაც ის ჩაენაცვლება ძირითად ატომს, მას მესერში მოაქვს ერთი ზედმეტი ელექტრონი. მაგალითად, სილიციუმის (ოთხვალენტიანი) მესერში ჩაენაცვლოთ ფოსფორის (ხუთვალენტიანი) ატომი (ნახ. 2.13,ა). აბსოლუტურ ნულ ტემპერატურაზე ფოსფორის ოთხი ელექტრონი მონაწილეობს რა ბმაში, ენერგეტიკულად განლაგდება სავალენტო ზონაში, ხოლო მეხუთე (ბმაში არმონაწილე) ელექტრონის ენერგია სავალენტო ზონას აღარ შეესაბამება. ამავე დროს, უნდა აღინიშნოს, რომ ეს ელექტრონი სუსტად არის დაკავშირებული თავის ბირთვთან, ვინაიდან მასა და ბირთვის შორის არსებული კულონური ურთიერთქმედება შესუსტებულია კრისტალის დიელექტრიკული შეღწევადობით და მის გასანთავისუფლებლად მცირე ენერგიაა საჭირო (ეს ენერგია გაცილებით მცირეა როგორც იზოლირებული ატომის იონიზაციის ენერგიაზე, ასევე ნახევრად გამტარის აკრძალული ზონის სიგანეზე). მაშასადამე, ამ ელექტრონის ატომური ხასიათის ენერგეტიკული დონე განლაგდება აკრძალულ ზონაში გამტარობის ზონის მახლობლად (ნახ. 2.13,ბ). ენერგეტიკული შუალედი ამ დონეს და გამტარობის ზონის მინიმუმს შორის განსაზღვრავს კრისტალში მყოფი ატომის იონიზაციის ენერგიას. ამ შემთხვევაში დონორული დონის ენერგიას უარყოფითად მიიჩნევენ, რადგან მისი ათვლა წარმოებს გამტარობის ზონის ფსკერიდან. ცხადია, რამდენი მინარეული ატომიც იქნება კრისტალში, იმდენი დონორული დონე წარმოიქმნება. $T = 0K$ ტემპერატურაზე დონორულ დონეებზე განლაგებული ელექტრონების კონცენტრაცია განისაზღვრება თვით დონორული ატომების კონცენტრაციით.

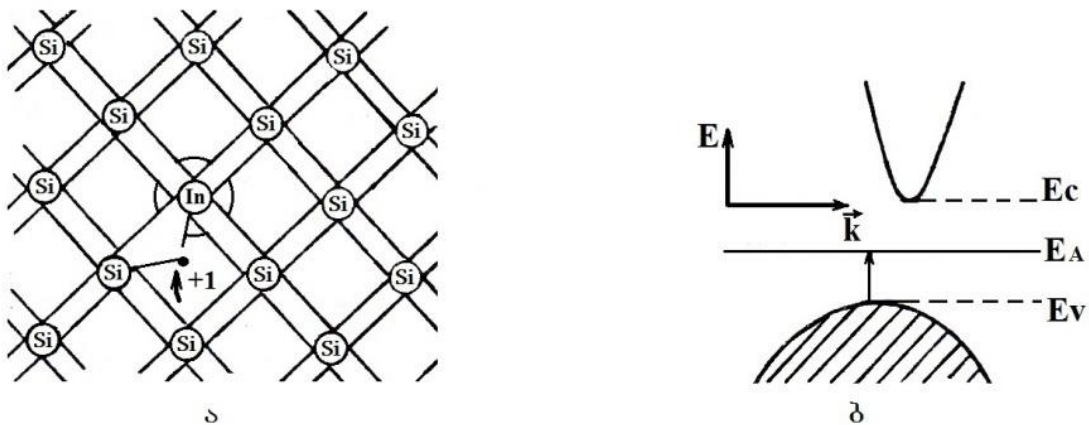


ნახ. 2.13. მინარეული ელექტრონული გამტარობის წარმოქმნის მოდელი: ა) სიბრტყითი გამოსახულება; ბ) ენერგეტიკული ზონური დიაგრამა

ტემპერატურის მომატებისას, როდესაც შესაბამისი სითბური ენერგია დონორის იონიზაციის ენერგიის რიგისაა, შეიძლება ადგილი ჰქონდეს დონორული დონიდან ელექტრონის გადასვლას გამტარობის ზონაში, რის შედეგადაც იზრდება თავისუფალი მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია, კრისტალში გვექნება თავისუფალი ელექტრონები, რომელთა კონცენტრაცია განისაზღვრება დონორული დონეებისა და მათზე დარჩენილი ელექტრონების კონცენტრაციითა სხვაობით. ამ შემთხვევაში გამტარობა განპირობებული იქნება მხოლოდ თავისუფალი ელექტრონებით ($\sigma = \sigma_n = en\mu_n$), ვინაიდან დონორულ დონეებზე დარჩენილ ვაკანსიებს ენერგიის ცვლილების უნარი არ გააჩნია და ამიტომ თავისუფალ ხერვლებად არ შეიძლება იყვნენ განხილული $\sigma_p = 0$.

შემდგომშიც, როდესაც ტემპერატურა იმდენად გაიზრდება, რომ ადგილი ექნება ელექტრონების გადასვლას სავალენტო ზონიდან გამტარობის ზონაში, ელექტრონების კონცენტრაცია ყოველთვის მეტი დარჩება ხერვლების კონცენტრაციაზე.

განვიხილოთ მეორე შემთხვევა: მინარევის ვალენტობა 1-ით ნაკლებია ძირითადი ატომის ვალენტობაზე (აქცეპტორული მინარევი) მაგალითად, ინდიუმის ატომი ჩანაცვლებულია სილიციუმის მესერში ნახ. 2.14,ა.



ნახ. 2.14. მინარეული ხერვლური გამტარობის წარმოქმნის მოდელი: ა) სიბრტყითი გამოსახულება; ბ) ენერგეტიკული დიაგრამა

ვინაიდან ინდიუმს მხოლოდ სამი სავალენტო ელექტრონი გააჩნია, მის მახლობლად ერთი ბმა დარჩება შეუვსებელი. ცხადია, ამ შეუვსებელი ბმის დაკავებას ტემპერატურის გაზრდისას მარტივად შეძლებს ძირითადი ატომის სავალენტო ელექტრონი და ამდენად, მარტივად წარმოიქმნება ხერვლი თავისუფალი ელექტრონის წარმოქმნის გარეშე; ეს კი ენერგეტიკული დიაგრამის ენაზე ნიშნავს, რომ როდესაც ელექტრონი გადავა სავალენტო ზონიდან მინარეული ატომის (აქცეპტორის) მიერ შექმნილ დონეზე, კრისტალში გაჩნდება თავისუფალი ხერვლების გარკვეული კონცენტრაცია, რომელიც აქცეპტორული დონეების და ამ

დონეებზე დარჩენილი დაუკავებელი მდგომარეობების კონცენტრაციათა სხვაობით განისაზღვრება (ნახ. 2.14,ბ). ვინაიდან მცირე ენერგიაა საჭირო მეზობელი ბმოდან შეუვსებელ ბმაზე ელექტრონის გადასაყვანად, აქცეპტორული დონე განლაგდება აკრძალულ ზონაში, სავალენტო ზონის ჭერის მახლობლად. $T = 0K$ ტემპერატურაზე ეს დონე მთლიანად თავისუფალია. დაბალ ტემპერატურაზე, $k_0T \ll \Delta E_g$ გამტარობას ექნება მხოლოდ ხვრელური ხასიათი ($\sigma = \sigma_p = en\mu_p$), მაღალ ტემპერატურაზე, როდესაც გამოვლინდება საკუთარი გამტარობა, ხვრელების კონცენტრაცია მაინც ყოველთვის მეტი იქნება ელექტრონების კონცენტრაციაზე.

ამრიგად, შეიძლება ვილაპარაკოთ ნახევრად გამტარებში სამი ტიპის გამტარობაზე:

1. საკუთარი გამტარობა – $n_i = p_i$; ($\sigma_n > \sigma_p$, რადგანაც $\mu_n > \mu_p$);
2. n – ტიპის გამტარობა – $n > p$; ($\sigma_n > \sigma_p$);
3. p – ტიპის გამტარობა – $p > n$; (აღსანიშნავია, რომ ამ შემთხვევაში $\sigma_p > \sigma_n$ არ იქნება აუცილებლად დაცული, ვინაიდან $\mu_p < \mu_n$ ყოველთვის).

n და p ტიპის ნახევრად გამტარებთან ერთად ხშირად გამოიყენება აგრეთვე ტერმინი - კომპენსირებული ნახევრად გამტარი. ეს ისეთი ნახევრად გამტარია, რომელშიც შეყვანილია როგორც დონორული, ასევე აქცეპტორული მინარევეები. ცხადია, ეს მინარეული ატომები აკომპენსირებენ ერთმანეთს და საბოლოოდ, ნახევრად გამტარის ტიპი დამოკიდებულია იმაზე, თუ რომელი ტიპის მინარევის კონცენტრაციაა მეტი.

2.7. მინარეული მდგომარეობის ელემენტარული თეორია

მინარევის ატომური ხასიათის ენერგეტიკული მდგომარეობის ლოკალიზაცია აკრძალულ ზონაში დამოკიდებულია იმაზე, მინარევის ვალენტობა განსხვავდება ერთით ($\Delta v = \pm 1$), თუ მეტად ($\Delta v \geq \pm 2$) ძირითადი ატომის ვალენტობისაგან. პრაქტიკაში ფართოდ გამოიყენება ისეთი ნახევრად გამტარები, რომელთა მახასიათებელი პარამეტრების გარკვეული მნიშვნელობები მიიღწევა ძირითადად ისეთი მინარევეებით ლეგირებისას, რომ $\Delta v = \pm 1$. ასეთი მინარევეები (მათ წყალბადის-მაგვარ მინარევეებს უწოდებენ) ქმნიან თხელ დონეებს, რომელთა ენერგეტიკული დაშორება შესაბამისი დაშვებული ზონიდან მცირეა. ასეთი მინარევეების იონიზაციის ენერგიის შეფასებისათვის შეგვიძლია დავყვარდნოთ წყალბადის ატომისათვის ჩაწერილ შრედინგერის განტოლებას

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + \frac{e^2}{|\vec{r}|} \right\} \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (2.22)$$

იმისათვის, რომ გამოვიყენოთ ეს განტოლება წყალბადისმაგვარი მინარევისათვის, საჭიროა ელექტრონის ნომინალური მასა m_0 შეცვალოთ მისი ეფექტური m^* მნიშვნელობით, კულონურ ურთიერთქმედებაში გავითვალისწინოთ კრისტალის დიელექტრიკული შეღწევადობა ϵ^* და ტალღურ ფუნქციას მიეცეთ ბლოხის ტალღური ფუნქციის სახე. მაშინ დონორისა და აქცეპტორისათვის შრედინგერის განტოლება ასე გადაიწერება:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \frac{e^2}{\epsilon^* |\vec{r}|} \right\} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.23)$$

აქედან მარტივად დაგადგენთ კრისტალში მინარეული დონის ენერჯიას

$$|E| = \frac{e^4}{2\hbar^2} \frac{m^*}{\epsilon^2} \frac{1}{n^2}. \quad (2.24)$$

თუ ამ უკანასკნელში შევიტანთ e , m_0 და \hbar -ის რიცხვით მნიშვნელობას და ენერჯიას გამოვსახავთ ელექტრონვოლტებში, მაშინ გვექნება:

$$|E| = \frac{13,52}{\epsilon^2} \frac{m^*}{m_0} \frac{1}{n^2}, \quad (2.25)$$

სადაც n კვანტური რიცხვია, რომელიც განსაზღვრავს მინარევის ადგილების სხვადასხვა დონეს ($n > 1$). ვინაიდან ენერჯიის სიმცირის გამო, მინარევის ადგილებზე მდგომარეობებზე ელექტრონის დაფიქსირება შესაძლებელია მხოლოდ აბსოლუტური ნულის მახლობელ ტემპერატურებზე, ამიტომ უმეტეს შემთხვევაში განიხილება მინარევის მხოლოდ ძირითადი ($n = 1$) მდგომარეობა.

შევაფასოთ რეალურ ნახევრად გამტარ კრისტალში დონორისა და აქცეპტორის იონიზაციის ენერჯიები. ჩავთვალოთ, რომ $\epsilon^* = 15$; $m_n^* = 0,2m_0$; $m_p^* = 0,6m_0$; (2.25) გამოსახულებაში ამ მონაცემების გამოყენებით მივიღებთ $E_D = -0,01$ ევ, $E_A = -0,03$ ევ. ექსპერიმენტის შედეგებთან შედარებით აღმოჩნდა, რომ ასეთი ელემენტარული თეორია საშუალებას გვაძლევს სწორად შევაფასოთ მინარევის იონიზაციის ენერჯიის რიგი. ამავე დროს, ამ თეორიას აქვს ერთი მნიშვნელოვანი ნაკლი. კერძოდ, (2.25) გამოსახულებაში არ შედის თვით მინარევის მახასიათებელი არც ერთი სიდიდე, ე.ი. იონიზაციის ენერჯია გამოდის დამოკიდებული მხოლოდ იმ ნივთიერებაზე, რომელშიც მინარევეები განიხილება და კონკრეტულ ნახევრად გამტარულ კრისტალში ყველა მინარევისათვის მისი მნიშვნელობა ერთი და იგივე გამოდის. ცდამ გვიჩვენა, რომ ეს სინამდვილეს არ შეესაბამება (ცხრილი 2.3) და არ შეიძლება იონიზაციის ენერჯია დამოკიდებული არ იყოს კონკრეტულ მინარეულ ატომზე.

თუ მინარევის ვალენტობა ± 2 ან მეტად განსხვავდება ძირითადი ატომის ვალენტობისაგან, მაშინ ლოკალური მინარეული დონეების განლაგება ენერგეტიკულ ზონურ სტრუქტურაში მნიშვნელოვნად იცვლება. ჯერ ერთი, ასეთი დონე გაცილებით უფრო დრამად იქნება განლაგებული აკრძალულ ზონაში, მეორეც, თითოეულ მინარეულ ატომს შესწევს უნარი შექმნას აკრძალულ ზონაში რამდენიმე მინარეული დონე. მაგალითად, სპილენძის ატომები გერმანიუმში ქმნიან სამ აქცეპტორულ დონეს, რომლებიც შეესაბამებიან იონების სამ ტიპს – Cu^{1-} , Cu^{2-} , Cu^{3-} და რომელთა ენერგიები შესაბამისად ტოლია: 0,04 ევ, 0,33 ევ და 0,5 ევ.

ცხრილი 2.3

სხვადასხვა მინარევის იონიზაციის ენერგიები სილიციუმსა და გერმანიუმში

	ΔE_g	$ E_D $, ევ				$ E_A $, ევ				
		<i>P</i>	<i>As</i>	<i>Sb</i>	<i>Bi</i>	<i>B</i>	<i>Al</i>	<i>Ga</i>	<i>In</i>	<i>Tl</i>
<i>Si</i>	1.11	0.044	0.049	0.069	0.046	0.057	0.065	0.16	0.26	
<i>Ge</i>	0.67	0.012	0.0127	0.0096	-	0.0104	0.0102	0.0108	0.0112	0.01

აღსანიშნავია, რომ ზოგიერთი მინარევი (მაგ. ოქრო გერმანიუმსა და სილიციუმში) აკრძალულ ზონაში ქმნის როგორც დონორულ, ასევე აქცეპტორულ მდგომარეობებს. ასეთ მინარევს ამფოტერული მინარევი ეწოდება.

2.8. ექსიტონი. პოლარონი

თუ მკაცრად განვიხილავთ დეფექტის არსს, ე.ი. დეფექტად ჩავთვლით ნებისმიერ გადახრას მესრის პერიოდულობიდან, მაშინ, ალბათ, დეფექტად უნდა მივიჩნიოთ კვანძში განლაგებული ისეთი იონიც, რომელმაც რაღაც ცვლილებები განიცადა თავის კონფიგურაციაში, ანუ რომლის ერთი ელექტრონი ან ელექტრონების გარკვეული რაოდენობა იმყოფება ადგზნებულ მდგომარეობაში, თუმცა კვლავ ურთიერთქმედებს თავის საკუთარ ბირთვთან. ასეთ დეფექტს კრისტალში მოძრაობის უნარიც გააჩნია, ვინაიდან ადგზნება ერთი იონიდან შეიძლება გადაეცეს მეორე იონს.

ამავე დროს, შემდგომი განხილვისათვის მეტად მნიშვნელოვანია ის გარემოებაც, რომ ასეთი დეფექტის არსებობას და მოძრაობას თან არ ახლავს მუხტის ან მასის გადატანა მესერში. ჩვენ მიერ განხილულ დეფექტს ექსიტონი

ეწოდება. ექსიტონი თავდაპირველად თეორიულად იყო ნაწინასწარმეტყველები და მხოლოდ შემდეგ აღმოჩენილი ექსპერიმენტულადაც.

პრინციპულად, ექსიტონის წარმოქმნა შესაძლებელია ნებისმიერ მყარ სხეულში, მაგრამ აღმოჩნდა, რომ ურთიერთქმედება ადგენებულ ელექტრონსა და მის იონს შორის მნიშვნელოვნად განსხვავდება სხვადასხვა ტიპის სხეულებში. ლითონებში ექსიტონები პრაქტიკულად არ გვხვდება. დიელექტრიკებში ექსიტონის შემადგენლობაში შემავალი ელექტრონი ძლიერ ურთიერთქმედებაშია თავის ბირთვთან და მისი ორბიტის რადიუსი მესრის მუდმივის რიგისაა. ასეთ ექსიტონს ფრენკელის ექსიტონი ეწოდება. ნახევრად გამტარში ადგენებული ელექტრონი გაცილებით უფრო სუსტად ურთიერთქმედებს თავის ბირთვთან და შეიძლება მნიშვნელოვნად დაცილდეს მას. ორბიტის რადიუსი $\sim 10a$ რიგისაა. ასეთ ექსიტონს ვანიე-მოტის ექსიტონი ეწოდება. ნახევრად გამტარების ფიზიკის თვალსაზრისით ექსიტონი არის ელექტრონ-ხვრელის ბმული მდგომარეობა, რომელსაც შესწევს უნარი იმოძრაოს კრისტალში.

ექსიტონის ორბიტის რადიუსისა და ექსიტონის ბმის ენერჯის (ექსიტონის დაშლისათვის საჭირო ენერჯის) დასადგენად, ისევე როგორც წყალბადისმაგვარი მინარევისათვის, შეგვიძლია დავეყრდნოთ წყალბადის ატომის თეორიას, მაშინ ორბიტის რადიუსის გამოსათვლელად ვისარგებლოთ ფორმულით

$$r = \varepsilon^* \frac{m_0}{m_r^*} r_0, \quad (2.26)$$

სადაც r_0 ბორის პირველი რადიუსია; m_r^* ეწოდება დაყვანილი ეფექტური მასა, რომელიც ელექტრონისა და ხვრელის ეფექტური მასების კომბინაციას წარმოადგენს

$$m_r^* = \frac{m_n^* m_p^*}{m_n^* + m_p^*}, \quad (2.27)$$

შევაფასოთ ამ გამოსახულებით ექსიტონის ორბიტის რადიუსი. ვთქვათ, $m_r^* = 0.1m_0$, $\varepsilon^* = 15$, მაშინ $r \approx 100\text{\AA}$ ე.ი. $r \gg a$.

რაც შეეხება ექსიტონის ენერჯიას

$$|E_{ex}| = \frac{13,52}{\varepsilon^{*2}} \frac{m_r^*}{m_0} \frac{1}{n^2}, \quad (2.28)$$

როცა $n = 1$, მივიღებთ ექსიტონის ბმის ენერჯიას, რომელიც გამტარობის ზონის ძირიდან აითვლება. თუ (2.28) გამოსახულების საშუალებით შევაფასებთ ექსიტონის ბმის ენერჯიას ვნახავთ, რომ ეს ენერჯია $E_{ex} \sim 0.01 - 0.001$ ევ რიგისაა და იგი რამდენადმე ნაკლებია, ვიდრე დონორის იონიზაციის ენერჯია წყალბადისმაგვარი მინარევის მიახლოებაში. ეს არცაა გასაკვირი, რადგან (2.28)

ფორმულაში არსებული m_r^* ყოველთვის ნაკლებია ელექტრონის ეფექტურ მასაზე $m_r^* < m_n^*$. ექსიტონი რომ წარმოიქმნას, საჭიროა ენერგია, რომელიც განისაზღვრება აკრძალული ზონის სიგანისა და ექსიტონის ბმის ენერგიების სხვაობით.

თუ გამტარობის ელექტრონი სივრცულად ლოკალიზებული იქნება მესერში. ამ ადგილას მოხდება მესრის პერიოდულობის დამახინჯება – გამოვლინდება იონის პოლარიზაცია და თანაც ელექტრონით განპირობებული ასალი მდგომარეობა ურთიერთქმედებაში იქნება თვით პოლარიზაციის გამომწვევ ელექტრონთან. ამ კომბინაციას, ელექტრონისა და მესრის პოლარიზაციის კომბინაციას, წარმოადგენენ კვანზინაწილაკის – პოლარონის სახით. მას მესერში გადაადგილების უნარი გააჩნია, მაგრამ მისი ეფექტური მასა მნიშვნელოვნად მეტია ელექტრონის ეფექტურ მასაზე $m_{p1}^* \gg m_n^*$.

თაზი III.
მუხტის გადამტანების სტატისტიკა
ნახევრად გამტარებში.

3.1. განაწილების ფუნქცია. ფერმის ენერგია

იდეალური და რეალური ნახევრად გამტარების ენერგეტიკული სპექტრის განხილვისას ჩვენ ვეყრდნობით ძირითადად კვანტური ფიზიკის კანონებს და ნაკლებად ვაქცევდით ყურადღებას იმ გარემოებას, რომ ელექტრონები და ხვრელები მრავალნაწილაკიან სისტემას ქმნიან და მათთვის სამართლიანი უნდა იყოს სტატისტიკური ფიზიკის კანონები. კლასიკური სტატისტიკური ფიზიკა არ ითვალისწინებს ნაწილაკთა კვანტური თვისებების სპეციფიურობას და ამიტომ ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის სტატისტიკური ფიზიკის კანონებში გათვალისწინებული უნდა იყოს ის თავისებურებები, რომლებიც ნაწილაკების კვანტური ბუნებიდან გამომდინარეობს.

მუხტის გადამტანების სტატისტიკა რამდენიმე ძირითად ცნებას ეყრდნობა, რომელთაგან უმნიშვნელოვანესია განაწილების ფუნქცია და ფერმის ენერგია.

განაწილების ფუნქციის შემოსატანად განვიხილოთ N ელექტრონიანი სისტემა და ამ სისტემიდან გამოვეყოთ N_1 რაოდენობა იმ ელექტრონებისა, რომელთა კოორდინატები მოთავსებულია $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ შუალედში, ხოლო კვაზიიმპულსები $\Delta P_x, \Delta P_y, \Delta P_z$. ცხადია, რომ ელექტრონების ეს N_1 რაოდენობა მით უფრო მეტი იქნება, რაც უფრო დიდი მოცულობის ელემენტებს გამოვეყოფთ კოორდინატთა და იმპულსურ სივრცეებში

$$N_1 \sim (\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta P_x \cdot \Delta P_y \cdot \Delta P_z), \quad (3.1)$$

ან, თუ შემოკლებით ჩავწერთ,

$$N_1 \sim (\Delta V \cdot \Delta V_p). \quad (3.2)$$

იმისათვის, რომ პროპორციულობიდან ტოლობაზე გადავიდეთ, უნდა გამოვიყენოთ კოეფიციენტი და ეს კოეფიციენტი თავად იქნება კოორდინატებისა და კვაზიიმპულსების ფუნქცია.

$$W = W(x, y, z, P_x, P_y, P_z, t), \quad (3.3)$$

მაშინ

$$N_1 = W \Delta V \cdot \Delta V_p. \quad (3.4)$$

კოორდინატა სივრცისა და იმპულსური სივრცის ცალ-ცალკე განხილვის ნაცვლად მოსახერხებელია შემოვიტანოთ ერთიანი სივრცე, რომელიც $\Delta V \cdot \Delta V_p$ ნამრავლით განისაზღვრება და ფაზური სივრცე ეწოდება.

$$N_1 = W \Delta \gamma. \quad (3.5)$$

ამ უკანასკნელი გამოსახულებიდან W ფიზიკური შინაარსი შეიძლება შემდეგნაირად ჩამოვაყალიბოთ: W არის $\Delta \gamma$ ფაზური სივრცის ელემენტში დროის მოცემულ მომენტში N_1 რაოდენობის ელექტრონების მოხვედრის ალბათობა

$$W = \frac{N_1}{\Delta \gamma}. \quad (3.6)$$

პრაქტიკული ამოცანების გადაწყვეტისას ხშირად საქმე გვაქვს ნაწილაკთა არა აბსოლუტურ (N_1), არამედ ფარდობით ($\frac{N_1}{N}$) რიცხვთან. ამიტომ მოსახერხებელია ჩავწეროთ

$$f = \frac{W}{N} = \frac{N_1}{N \Delta \gamma}. \quad (3.7)$$

განაწილების ფუნქცია f გვიჩვენებს $\Delta \gamma$ ფაზური სივრცის ელემენტში დროის t მომენტში ნაწილაკთა $\frac{N_1}{N}$ ფარდობითი რიცხვის მოხვედრის ალბათობა.

ელექტრონებისა და ხვრელების განაწილების ფუნქციები უნდა ითვალისწინებდეს იმ გარემოებას, რომ კრისტალში საქმე გვაქვს კვანტური ნაწილაკების – ფერმიონების სიმრავლესთან (ფერმიონი არის ნახევარსპინიანი ნაწილაკი, რომლის სპინის პროექცია დაკვანტვის დერძე დებულობს ორ მნიშვნელობას $S_z = \pm \frac{1}{2}$) და აქედან გამომდინარე, ერთ კვანტურ მდგომარეობაში (K_x, K_y, K_z, S_z), პაულის პრინციპის თანახმად, შეიძლება განლაგდეს მხოლოდ ერთი ელექტრონი.

ყოველივე ზემოთ აღნიშნულის საფუძველზე შეიძლება ვთქვათ, რომ განაწილების ფუნქცია f ახასიათებს კვანტურ მდგომარეობებზე მუხტის გადამტანთა განაწილების ალბათობის სიმკვრივეს. ამიტომ f განაწილების ფუნქციას განაწილების სიმკვრივესაც უწოდებენ. მისი ფიზიკური არსიდან გამომდინარე შეგვიძლია მარტივად ჩავწეროთ ნორმირების პირობა

$$\int_{\Gamma} f \Delta \gamma = 1 \quad (3.8)$$

(ინტეგრება წარმოებს მთელ Γ ფაზურ მოცულობაზე).

შემოვიტანოთ ფერმის ენერჯიის ცნება. ამისათვის ელექტრონების N სიმრავლე განვიხილოთ $0K$ ტემპერატურაზე. სიმრავლის ენერჯია აღნიშნოთ E -თი. კლასიკური ფიზიკის თვალსაზრისით $T = 0K$ აღნიშნული სისტემის ენერჯიის ცვლილება შეიძლება დაკავშირებული იყოს მხოლოდ თავისუფალი ენერჯიის F_0

ცვლილებასთან. თუ გავითვალისწინებთ, რომ სისტემა კვანტური თვისებების მატარებელია და ასეთ სისტემაში ნაწილაკთა რაოდენობა შეიძლება შეიცვალოს, მაშინ ენერჯის ცვლილება $0K$ ტემპერატურაზე ნაწილაკთა რაოდენობის ცვლილებითაც შეიძლება იყოს გამოწვეული

$$dE|_{T=0K} = dF_0 + \mu dN, \quad (3.9)$$

μ ქიმიურ პოტენციალს უწოდებენ. მისი ფიზიკური არსის დასადგენად ჩავთვალოთ, რომ $dE = 0$, მაშინ

$$\mu = \left| \frac{dF_0}{dN} \right|, \quad (3.10)$$

ანუ ქიმიური პოტენციალი გვიჩვენებს სისტემის თავისუფალი ენერჯის ცვლილების სიდიდეს ნაწილაკთა რიცხვის ერთით ცვლილებისას.

გავითვალისწინოთ აგრეთვე, რომ აღნიშნული კვანტური სისტემა დამუხტულ ნაწილაკთა ერთობლიობას წარმოადგენს, ამიტომ ენერჯის ცვლილებას შეიძლება ადგილი ჰქონდეს მუხტის ცვლილების გამოც, როდესაც იცვლება ნაწილაკთა რიცხვი სისტემაში

$$dE|_{T=0K} = dF_0 + \mu dN + \Psi dq, \quad (3.11)$$

ცხადია

$$dq = -e dN \quad (3.12)$$

და ე.ი.

$$dE|_{T=0K} = dF_0 + (\mu - e\Psi)dN \quad (3.13)$$

Ψ -ს ელექტროსტატიკური პოტენციალი ეწოდება, ხოლო

$$F \equiv \mu^* = \mu - e\Psi \quad (3.14)$$

უწოდებენ ელექტროქიმიურ პოტენციალს ან ფერმის ენერჯიას. თუ $dE = 0$, მაშინ (3.13)-დან

$$F = \left| \frac{dF_0}{dN} \right|, \quad (3.15)$$

ე.ი. ფერმის ენერჯია (3.15)-ის მიხედვით შეიძლება წარმოვადგინოთ როგორც დამუხტულ კვანტურ ნაწილაკთა სისტემის თავისუფალი ენერჯის ცვლილების სიდიდე, ამ ნაწილაკთა რაოდენობის ერთით ცვლილებისას.

ცხადია, ფერმის ენერჯიას ენერგეტიკულ ზონურ სტრუქტურაში შეიძლება შევუსაბამოთ გარკვეული ენერგეტიკული დონე, რომელსაც ფერმის დონე ეწოდება. ფერმის ენერჯია, ანუ ფერმის დონე ენერჯის ის მნიშვნელობაა, რომლის ქვემოთ ყველა არსებული კვანტური ენერგეტიკული მდგომარეობები $T = 0K$ ტემპერატურაზე დაკავებულია ელექტრონებით, ხოლო მის ზემოთ – თავისუფალი, ან ფერმის

დონე არის ის მაქსიმალური ენერგია, რომელიც ელექტრონს ამ ტემპერატურაზე შეიძლება გააჩნდეს ლითონში.

თუ ჩავთვლით, რომ ელექტრონები (ფერმიონები) არ ურთიერთქმედებენ ერთმანეთთან, ანუ ქმნიან იდეალურ ფერმი გაზს, მაშინ ფერმის ენერგია შეიძლება გამოვთვალოთ ფორმულით

$$F = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{3n}{4\pi^2(2S+1)} \right]^{\frac{2}{3}}, \quad (3.16)$$

სადაც n კონცენტრაციაა; S – სპინი.

ფერმის ენერგიის საშუალებით შეიძლება განსაზღვრული იყოს ფერმი-იმპულსი

$$P_F = \sqrt{2m_0F}, \quad (3.17)$$

რომლის ფიზიკური არსი იმაში მდგომარეობს, რომ $T = 0K$ თუ $P < P_F$ მაშინ ყველა მდგომარეობა დაკავებულია ელექტრონებით, ხოლო $P > P_F$ – თავისუფალი.* ამდენად, იდეალური ფერმი-გაზის შემადგენელი ნაწილაკები $T = 0K$ -ზე მოთავსებული აღმოჩნდებიან სფეროში, რომლის რადიუსი P_F -ით განისაზღვრება. ეს სფერო ქმნის იმპულსურ სივრცეში ფერმი-ზედაპირს. ამავე დროს, ფერმი-იმპულსი განსაზღვრავს ელექტრონის მაქსიმალურ სიჩქარეს $0K$ ტემპერატურაზე – ფერმი-სიჩქარეს

$$V_F = \frac{P_F}{m_0}. \quad (3.18)$$

ცნობილია, რომ ლითონებში ფერმის ენერგია $F \sim (1-10)eV$, გადაგვარებულ ნახევრად გამტარებში კი – $F \sim (0.01-1)eV$.

3.2. მდგომარეობათა სიმკვრივე. მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მასა

მუხტის გადამტანების სტატისტიკის ერთ-ერთი ძირითადი ამოცანაა დაშვებულ ზონებსა და ლოკალურ დონეებზე მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის დადგენა. დაშვებულ ზონებში ამ ამოცანის გადაწყვეტა მოითხოვს პირველ ეტაპზე ზონაში კვანტური მდგომარეობების რიცხვის ცოდნას. ამ მიზნით შემოტანილია მდგომარეობათა სიმკვრივის რიცხვის ცნება – კრისტალის ერთეულოვან ენერგეტიკულ ინტერვალში კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვი

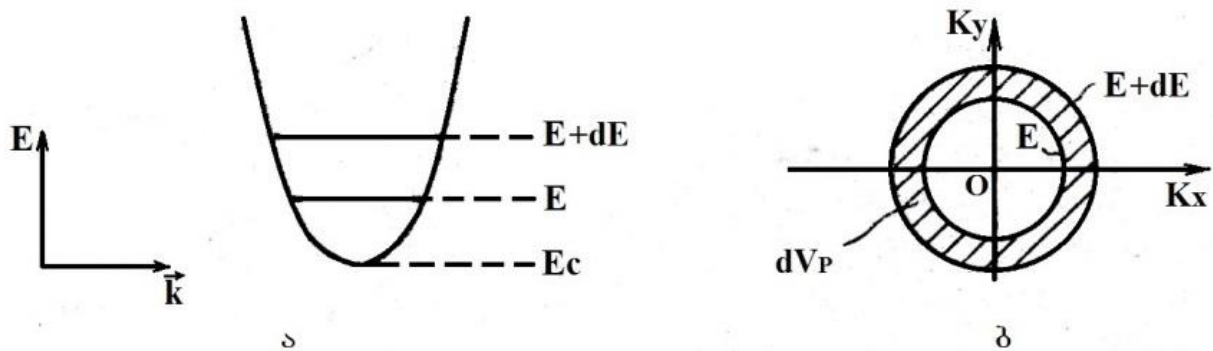
*ამის შესახებ დაწვრილებით იხილეთ 3.3-ში.

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE}, \quad (3.19)$$

N კვანტურ მდგომარეობათა რიცხვია.

იმისათვის, რომ $\rho(E)$ დამოკიდებულებას მივცეთ კონკრეტული სახე, თავდაპირველად განვიხილოთ მარტივი, სფერული სიმეტრიის გამტარობის ზონა, რომლისთვისაც სამართლიანია დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონი (1.103). გამოვყოთ გამტარობის ზონის ფარგლებში ენერგეტიკული შუალედი E -დან $E + dE$ -მდე (ნახ. 3.1.ა). კვანტური მდგომარეობების რაოდენობა დაკავშირებულია იმპულსურ სივრცეში გამოყოფილი ინტერვალის მოცულობის ელემენტთან შემდეგი გამოსახულებით:

$$dN = 2 \frac{dV_P}{v_P'} = 2 \frac{dV_P}{h^3}, \quad (3.20)$$



ნახ. 3.1. სფერული სიმეტრიის გამტარობის ზონაში გამოყოფილი dE ენერგეტიკული ინტერვალი (ა); ამ ინტერვალის მოცულობა იმპულსურ სივრცეში (ბ).

სადაც V_P' არის ერთ კვანტურ მდგომარეობაზე მოსული ფაზური სივრცის მოცულობა, კოეფიციენტი "2" ითვალისწინებს თითოეულ ენერგეტიკულ დონეზე ორი კვანტური მდგომარეობის არსებობის შესაძლებლობას. $\rho(E)$ დამოკიდებულების საბოლოო გამოსახულების დასადგენად გამოყოფილი მოცულობის ელემენტი

$$dV_P = 4\pi P^2 dP \quad (3.21)$$

განვსაზღვროთ დისპერსიის კანონის გამოყენებით

$$P^2 = \hbar^2 k^2 = 2m_n^*(E - E_c); \quad (3.22)$$

$$dP = \frac{1}{2} (2m_n^*)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{-\frac{1}{2}} dE. \quad (3.23)$$

თუ (3.21-3.23) გამოსახულებებს გავითვალისწინებთ (3.20)-ში გვექნება:

$$dN = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{-\frac{1}{2}} dE. \quad (3.24)$$

(3.24) ფორმულის (3.19) გამოსახულებაში ჩასმით მივიღებთ გამტარობის ზონის მდგომარეობათა სიმკვრივეს სფერული სიმეტრიის ზონისათვის

$$\rho E = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_C)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.25)$$

ამ უკანასკნელი გამოსახულებიდან გამომდინარეობს, რომ მდგომარეობათა სიმკვრივე დამოკიდებულია მუხტის გადამტანების ეფექტურ მასაზე და ენერგიაზე $\rho(m^*, E)$.

მაგალითისათვის განვიხილოთ ორი გამტარობის ზონა, რომლებიც აკმაყოფილებენ შემდეგ პირობებს: $m_{n1}^* > m_{n2}^*$. ვინაიდან პირველ ზონაში ეფექტური მასა უფრო მეტია, ვიდრე მეორე ზონაში, ამიტომ მდგომარეობათა სიმკვრივე პირველ ზონაში გადააჭარბებს მეორე ზონაში მდგომარეობათა სიმკვრივეს. ეს კი ნიშნავს, რომ ერთი და იგივე რაოდენობის ელექტრონები პირველ გამტარობის ზონაში შეავსებენ უფრო მცირე ენერგიათა ინტერვალს, ვიდრე მეორე ზონაში.

იმისათვის, რომ (3.25) გამოსახულება სამართლიანი იყოს ნებისმიერი სიმეტრიის და ბრილუენის ზონის ნებისმიერ წერტილში განლაგებული გამტარობის ზონის ექსტრემუმისათვის, გამოვიყენოთ სხვა კოეფიციენტი, რომელსაც მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მასა ეწოდება

$$m_{dn}^* = M^{\frac{2}{3}} (m_1^* m_2^* m_3^*)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.26)$$

სადაც M ექვივალენტური მინიმუმების რაოდენობაა. კერძო შემთხვევაში, როცა საქმე გვაქვს ბრუნვით ელიფსოიდთან (3.26) გამოსახულება მიიღებს სახეს

$$m_{dn}^* = M^{\frac{2}{3}} (m_{\perp}^{*2} m_{\parallel}^*)^{\frac{1}{3}}. \quad (3.27)$$

მაშასადამე, გამტარობის ზონის მდგომარეობათა სიმკვრივის ფორმულა ზოგადად ასე ჩაიწერება:

$$\rho_C(E) = 4\pi \left(\frac{2m_{dn}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_C)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.28)$$

მარტივი აგებულების, სფერული სიმეტრიის სავალენტო ზონისათვის, რომლისთვისაც სამართლიანია დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონი

$$\rho_V(E) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_V - E)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.29)$$

რეალური, კუბური სიმეტრიის ნახევრად გამატარებისათვის, როგორც ვიცით (იხ. თავი II), სავალენტო ზონის აბსოლუტური მაქსიმუმი რთული აგებულებისაა და შედგება სამი ქვეზონისაგან: – მძიმე, მსუბუქი და სპინ-ორბიტული ხვრელების ქვეზონებისაგან. ვინაიდან ხვრელები ყოველთვის ცდილობენ დაიკავონ მაქსიმალურად მაღალი ენერგეტიკული მდგომარეობა, ამიტომ სპინ-ორბიტული ხვრელების ქვეზონაში მათი არსებობის ალბათობა ძალიან მცირეა. აქედან

გამომდინარე, მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მასის განხილვისას სავალენტო ზონისათვის შეგვიძლია შემოვიფარგლოთ მხოლოდ ზედა ორი ქვეზონით.

თუ გავისხენებთ, რომ სავალენტო ზონების იზოენერგეტიკული ზედაპირების დეფორმაციის მიუხედავად მათ მაინც სფერულ სიმეტრიას მივაკუთვნებთ, მაშინ მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მასისათვის გვექნება

$$m_{dp}^* = \left(m_{hp}^* \frac{3}{2} + m_{\perp}^* \frac{3}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.30)$$

და სავალენტო ზონის მდგომარეობათა სიმკვრივე ჩაიწერება შემდეგი თანაფარდობით:

$$\rho_V(E) = 4\pi \left(\frac{2m_{dp}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_V - E)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.31)$$

3.3. ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია

დაშვებულ ზონებში თავისუფალი ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაციის დასადგენად ცნობილი უნდა იყოს მდგომარეობათა სიმკვრივე და განაწილების ფუნქცია. გავეცნოთ განაწილების ფუნქციის კონკრეტულ სახეს. ამისათვის გამოვიყენოთ სტატისტიკური ფიზიკის ორი ცნობილი გამოსახულება:

1. თეორემა საშუალო მნიშვნელობის შესახებ

$$\vec{f} = \frac{\sum_N N_i \omega_i}{\sum_N \omega_i}. \quad (3.32)$$

2. გიბსის განაწილება

$$\omega = C e^{-\frac{E - NF}{K_0 T}}. \quad (3.33)$$

ამ თანაფარდობებში C მუდმივაა; N - ნაწილაკების რაოდენობა ენერგეტიკულ მდგომარეობაში; F - ფერმის ენერგია.

გავითვალისწინოთ, რომ გარკვეული მდგომარეობის სრული ენერგია E ეს არის ენერგეტიკული დონის ენერგიის ნამრავლი ამ დონეზე არსებული ნაწილაკების რიცხვზე

$$E = N_i E_i. \quad (3.34)$$

(3.33) და (3.34) გამოსახულებები გავითვალისწინოთ (3.32)-ში

$$f(E) = \frac{\sum_N N_i \exp\left[-\frac{N_i(E_i - F)}{K_0 T}\right]}{\sum_N \exp\left[-\frac{N_i(E_i - F)}{K_0 T}\right]} \quad (3.35)$$

აჯამვა უნდა ვაწარმოთ პაულის პრინციპის გათვალისწინებით, ე.ი. N_i -ს შეუძლია მიიღოს მხოლოდ ორი მნიშვნელობა: ან 0 (კვანტური მდგომარეობა დაუკავებელია

ელექტრონით) ან 1 (ელექტრონს უკავია მოცემული კვანტური მდგომარეობა). მაშინ მივიღებთ გამოსახულებას:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-F}{k_0 T}}}, \quad (3.36)$$

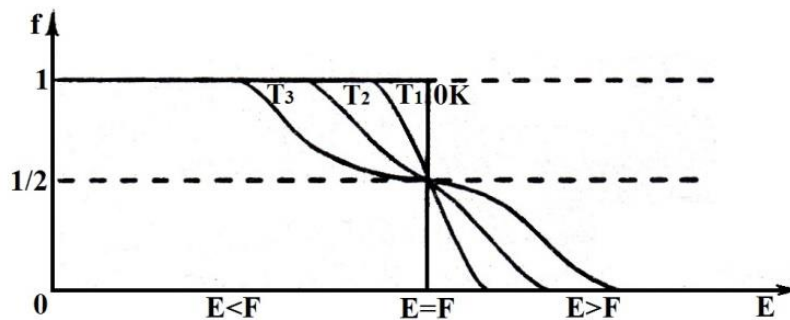
რომელსაც ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია ეწოდება. ამ განაწილებას ემორჩილება ფერმიონები და ამდენად, ნახევრად გამტარში მყოფი ელექტრონებიც.

გავანალიზოთ (3.36) ფორმულა. თავდაპირველად განვიხილოთ შემთხვევა, როცა $T = 0K$. ამ დროს შესაძლებელია რეალიზებულ იქნას ორი ვარიანტი:

ა) $0 < E < F$, განაწილების ფუნქცია $f = \frac{1}{1 + e^{-\infty}} = 1$;

ბ) $E > F$ მაშინ $f = \frac{1}{1 + e^{\infty}} = 0$,

ე.ი. $T = 0K$ განაწილების ფუნქციას უნდა ჰქონდეს სულ ორი მნიშვნელობა 0 ან 1. მაშასადამე, თუ საქმე გვაქვს ისეთ მდგომარეობასთან, რომლის ენერგია ნაკლებია ფერმის ენერგიაზე, მაშინ ის აუცილებლად დაკავებულია ელექტრონით, ხოლო თუ მდგომარეობის ენერგია ფერმის ენერგიაზე მეტია, მაშინ $T = 0K$ -ზე ეს მდგომარეობა აუცილებლად დაუკავებელია (ნახ. 3.2). გრაფიკზე, გარდა ამისა, ნაჩვენებია, რომ ტემპერატურის ზრდასთან ერთად განაწილების ფუნქციის ენერგიაზე დამოკიდებულება სულ უფრო სცილდება იმ იდეალურ სახეს, რომელიც მას აბსოლუტურ ნულზე გააჩნია, მაგრამ ამავე დროს ნებისმიერ ტემპერატურაზე განაწილების ფუნქციის თავისებურება მდგომარეობს იმაში, რომ იგი $1/2$ -ს უტოლდება, როცა ელექტრონის ენერგია ემთხვევა ფერმის ენერგიას $f = \frac{1}{1 + e^0} = \frac{1}{2}$.



ნახ. 3.2. ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქციის გრაფიკული გამოსახულება

ჩატარებული ანალიზიდან გამომდინარე, შეიძლება ჩამოვყალიბოთ ფერმის დონის კიდევ ერთი განმარტება; ფერმის დონე ის დონეა, რომლის ელექტრონით დაკავების ალბათობა ნებისმიერ ტემპერატურაზე $1/2$ -ის ტოლია.

თუ ცნობილია ელექტრონის განაწილების ფუნქცია, მაშინ მეტად მარტივად დავადგენთ ხერხელის განაწილების ფუნქციასაც.

$$f_p(E) = 1 - f(E); \quad (3.37)$$

თუ გავითვალისწინებთ (3.36) გამოსახულებას, მივიღებთ

$$f_p(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{F-E}{k_0T}}}. \quad (3.38)$$

ნახევრად გამტარებში საკმაოდ ხშირად ელექტრონის ენერგია მნიშვნელოვნად ჭარბობს ფერმის ენერგიას ($E \gg F$ და $E - F \gg k_0T$). მაშინ (3.36) ფორმულაში ექსპონენტა მნიშვნელოვნად აჭარბებს ერთს და განაწილების ფუნქცია მარტივ სახეს მიიღებს

$$f(E) = e^{\frac{F-E}{k_0T}}, \quad (3.39)$$

რომელიც ცნობილია ბოლცმანის განაწილების ფუნქციის სახელწოდებით. როდესაც მუხტის გადამტანები ნახევრად გამტარში ემორჩილება ბოლცმანის სტატისტიკას, მაშინ ამბობენ, რომ ნახევრად გამტარი გადაუგვარებელია, ხოლო თუ მუხტის გადამტანები ემორჩილება ფერმი-დირაკის განაწილებას, მაშინ ელექტრონული აირი და შესაბამისად, ნახევრად გამტარიც გადაგვარებულია. გადაგვარების შედარებით ზუსტი კრიტერიუმი განხილული იქნება ქვემოთ.

3.4. მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია დაშვებულ ზონებში და ლოკალურ დონეებზე

დავადგინოთ თავისუფალი ელექტრონების კონცენტრაცია გამტარობის ზონაში, თავისუფალი ხვრელებისა – სავალენტო ზონაში, ლოკალიზებული ელექტრონებისა E_D ენერგიის დონორულ დონეზე და ლოკალიზებული ხვრელების E_A აქცეპტორულ დონეზე. ამისათვის, ცნობილი უნდა იყოს დაშვებულ ზონებში მდგომარეობათა სიმკვრივეები ($\rho_C(E); \rho_V(E)$) და განაწილების ფუნქციები ($f(E); f_p(E)$). მინარეულ დონეთა კონცენტრაციები ($N_D; N_A$) და ამ დონეებისათვის განაწილების ფუნქციები ($f_D(E); f_A(E)$). მაშინ მუხტის გადამტანების კონცენტრაციები გამოითვლება შემდეგ გამოსახულებებზე დაყრდნობით:

$$\left. \begin{aligned} n &= \int_{E_C}^{\infty} \rho_C(E) f(E) dE \\ p &= \int_{-\infty}^{E_V} \rho_V(E) f_p(E) dE \end{aligned} \right\} \text{I} \quad (3.40), (3.41)$$

$$\left. \begin{aligned} n_D &= N_D f_D(E) \\ p_A &= N_A f_A(E) \end{aligned} \right\} \text{II} \quad (3.42), (3.43)$$

თუ (3.28) და (3.36) გამოსახულებებს გავითვალისწინებთ (3.40)-ში, (3.31) და (3.38) კი (3.41)-ში, მაშინ ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის შესაბამისად მივიღებთ

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_{dn}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_C}^{\infty} \frac{(E-E_C)^{\frac{1}{2}}}{1+\exp\frac{(E-F)}{K_0T}} dE; \quad (3.44)$$

$$p = 4\pi \left(\frac{2m_{dp}^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{E_V} \frac{(E_V-E)^{\frac{1}{2}}}{1+\exp\frac{(F-E)}{K_0T}} dE; \quad (3.45)$$

(3.44) და (3.45)-ის გამარტივების მიზნით შემოვიღოთ ფარდობითი (უგანზომილებო) ენერგიები. ამისათვის შემოვიტანოთ შემდეგი აღნიშვნები ε – განსაზღვრავს ელექტრონის ფარდობით ენერგიას K_0T ერთეულებში და მისი ათვლა ხდება გამტარობის ზონის ძირიდან, ε_P – ხვრელის ფარდობით ენერგიას, ათვლა ხდება სავალენტო ზონის ჭერიდან; ε_g – აკრძალული ზონის ფარდობით სიგანეს; η – დაყვანილ ფერმის დონეს, რომელიც აგრეთვე ათვლილია გამტარობის ზონის ძირიდან

$$\left\{ \frac{E-E_C}{K_0T} = \varepsilon; \frac{E_V-E}{K_0T} = \varepsilon_P; \frac{E_C-E_V}{K_0T} = \varepsilon_g; \frac{F-E_C}{K_0T} = \eta \right\}, \quad (3.46)$$

მაშინ

$$\left\{ dE = K_0T d\varepsilon; \frac{E-F}{K_0T} = \frac{(E-E_C) - (F-E_C)}{K_0T} = \varepsilon - \eta; \right. \\ \left. \frac{F-E}{K_0T} = \frac{(F-E_C) + (E_V-E) + (E_C-E_V)}{K_0T} = \eta + \varepsilon_P + \varepsilon_g \right\}. \quad (3.47)$$

ზემოთ მოყვანილი აღნიშვნების გათვალისწინებით (3.44) და (3.45) გამოსახულებები მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_{dn}^* K_0T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{1+\exp(\varepsilon-\eta)}; \quad (3.48)$$

$$p = 4\pi \left(\frac{2m_{dp}^* K_0T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^0 \frac{\varepsilon_P^{\frac{1}{2}}}{1+\exp(\eta+\varepsilon_P+\varepsilon_g)}; \quad (3.49)$$

კიდევ ერთხელ შემოვიტანოთ აღნიშვნები

$$\left\{ \rho_C^* = 2 \left(\frac{2\pi m_{dn}^* K_0T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right. \quad (3.50)$$

$$\left. \rho_V^* = 2 \left(\frac{2\pi m_{dp}^* K_0T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \right. \quad (3.51)$$

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{1+\exp(\varepsilon-\eta)}; \quad (3.52)$$

$$F_{\frac{1}{2}}(-\eta - \varepsilon_g) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 \frac{\varepsilon_P^{\frac{1}{2}} d\varepsilon}{1+\exp(\eta+\varepsilon_P+\varepsilon_g)}, \quad (3.53)$$

სადაც ρ_c^* და ρ_v^* არის მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მნიშვნელობები, ხოლო $F_{\frac{1}{2}}(\eta)$ და $F_{\frac{1}{2}}(-\eta - \varepsilon_g)$ – ცნობილი არიან $1/2$ რიგის ფერმის ინტეგრალების სახელწოდებით (ინტეგრალის რიგი განისაზღვრება ენერჯიის ხარისხის მაჩვენებლის მიხედვით).

საბოლოოდ ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაციებისათვის მივიღებთ შემდეგ გამოსახულებებს:

$$n = \rho_c^* F_{\frac{1}{2}}(\eta). \quad (3.54)$$

$$P = \rho_v^* F_{\frac{1}{2}}(-\eta - \varepsilon_g). \quad (3.55)$$

ფერმის ინტეგრალებს ანალიზური ამონახსნი არა აქვთ, ამიტომ გამოიყენება მიახლოებითი გამოსახულებები, რომელთა სახე განისაზღვრება ფერმის დონის ენერგეტიკული მდგომარეობით:

1. თუ $-\infty < \left\{ \frac{\eta}{(-\varepsilon_g - \eta)} \right\} < 1$, მაშინ ფერმის ინტეგრალები გამოითვლება როგორც

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = e^\eta \quad (3.56)$$

$$F_{\frac{1}{2}}(-\eta - \varepsilon_g) = e^{-\varepsilon_g - \eta} \quad (3.57)$$

და კონცენტრაციებისათვის გვექნება

$$n = \rho_c^* e^\eta \quad (3.58)$$

$$p = \rho_v^* e^{-\varepsilon_g - \eta}, \quad (3.59)$$

როდესაც ფერმის დონე მდებარეობს აკრძალულ ზონაში და K_0T ენერჯიით მაინცაა დაშორებული დაშვებული ზონებიდან, მაშინ ასეთი ნახევრად გამტარი გადაუგვარებელია და მუხტის გადამტანები ემორჩილება ბოლცმანის სტატისტიკას.

(3.58), (3.59)-დან ირკვევა ρ_c^* და ρ_v^* პარამეტრების ფიზიკური შინაარსი. ვინაიდან ექსპონენციალური თანამამრავლი (3.58)-ში განსაზღვრავს E_c ენერჯიის კვანტური მდგომარეობის ელექტრონით, ხოლო (3.59)-ში E_v ენერგეტიკული მდგომარეობის ხვრელით დაკავების ალბათობებს, ამიტომ გადაუგვარებელ ნახევრად გამტარში ელექტრონების კონცენტრაცია ისეთივეა, როგორც იქნებოდა კრისტალის მოცულობის ერთეულში ρ_c^* რაოდენობის ერთნაირი E_c ენერჯიის მდგომარეობების არსებობისას და ასევე ხვრელების კონცენტრაციის დადგენისას სავალენტო ზონა შეიძლება შეიცვალოს E_v ერთნაირი ენერჯიის ρ_v^* რაოდენობის მდგომარეობებით.

2. თუ $5 < \left\{ \frac{\eta}{(-\eta - \varepsilon_g)} \right\} < \infty$, მაშინ ფერმის ინტეგრალებისა და შესაბამისად კონცენტრაციებისათვის გვექნება შემდეგი გამოსახულებები:

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \eta^{\frac{3}{2}} \quad (3.60)$$

$$F_{\frac{1}{2}}(-\eta - \varepsilon_g) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (-\eta - \varepsilon_g)^{\frac{3}{2}} \quad (3.61)$$

$$n = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \rho_C^* \eta^{\frac{3}{2}} \quad (3.62)$$

$$p = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \rho_V^* (-\eta - \varepsilon_g)^{\frac{3}{2}} \quad (3.63)$$

თუ ფერმის დონე შეჭრილია დაშვებულ ზონაში $5K_0T$ -ზე უფრო ღრმად, მაშინ ასეთი ნახევრად გამტარი მთლიანად გადაგვარებულია და მუხტის გადამტანები ემორჩილებიან ფერმი-დირაკის განაწილებას.

3. იმ შემთხვევაში, როდესაც $-1 < \left\{ \frac{\eta}{(-\eta - \varepsilon_g)} \right\} < 5$, კონცენტრაციები გამოითვლება როგორც

$$n = \frac{\rho_C^*}{0.27 + \exp(-\eta)} \cdot \quad (3.64)$$

$$p = \frac{\rho_V^*}{0.27 + \exp(\eta + \varepsilon_g)} \cdot \quad (3.65)$$

მესამე პირობის შესრულების დროს მუხტის გადამტანები კვლავ ემორჩილება ფერმი-დირაკის განაწილებას და შესაბამის ნახევრად გამტარს უბრალოდ გადაგვარებულს უწოდებენ.

ლოკალურ დონეებზე კონცენტრაციების გამოსაანგარიშებლად (3.42) და (3.43) გამოსახულებებში გათვალისწინებული უნდა იყოს განაწილების ფუნქციის სახე დონორული და აქცეპტორული დონეებისათვის

$$f_D = \frac{1}{1 + 0.5 \exp(-\varepsilon_D - \eta)} \cdot \quad (3.66)$$

$$f_A = \frac{1}{1 + 2 \exp(-\varepsilon_A + \varepsilon_g + \eta)} \cdot \quad (3.67)$$

სადაც გამოყენებულია აღნიშვნები

$$\left\{ \varepsilon_D = \frac{E_C - E_D}{K_0T}; \quad \varepsilon_A = \frac{E_A - E_V}{K_0T} \right\}. \quad (3.68)$$

ε_D წარმოადგენს დონორის იონიზაციის ფარდობით ენერგიას, ათვლილს გამტარობის ზონის ძირიდან, ხოლო ε_A - აქცეპტორის იონიზაციის ფარდობით ენერგიას, ათვლილს სავალენტო ზონის ჭერიდან.

საბოლოოდ აქცეპტორულ და დონორულ დონეებზე ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაციებისათვის მივიღებთ

$$n_D = \frac{N_D}{1 + 0.5 \exp(-\varepsilon_D - \eta)} \cdot \quad (3.69)$$

$$p_A = \frac{N_A}{1 + 2 \exp(-\varepsilon_A + \varepsilon_g + \eta)} \cdot \quad (3.70)$$

3.5. ფერმის დონე საკუთარ ნახევრად გამტარში

როგორც ზემოთ იყო ნახვენები, საკუთარი ეწოდება ისეთ ნახევრად გამტარს, რომლისთვისაც თავისუფალი ელექტრონებისა და ხვრელების კონცენტრაციები უტოლდება ერთმანეთს

$$n = p. \quad (3.71)$$

ამავე დროს, ეს ტოლობა საკუთარ ნახევრად გამტარში ელექტრონიტრალობის პირობასაც წარმოადგენს.

თავისუფალი ელექტრონების უარყოფითი მუხტი კომპენსირდება ხვრელების დადებითი მუხტით. ამ ნეიტრალობის პირობაზე დაყრდნობით განვსაზღვროთ, თუ სად არის განლაგებული ფერმის დონე საკუთარ ნახევრად გამტარში და როგორ იცვლება მისი მდებარეობა ტემპერატურის ცვლილებისას. განხილვა ჩავატაროთ გადაუგვარებელი ნახევრად გამტარისათვის, მაშინ (3.71) გამოსახულებაში წინა პარაგრაფში მიღებული (3.58) ფორმულების გამოყენებით ადვილად შეგვიძლია ვაჩვენოთ, რომ

$$F = -\frac{\Delta E_g}{2} + \frac{3}{4}k_0T \ln\left(\frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*}\right), \quad (3.72)$$

მაშასადამე, $0K$ ტემპერატურაზე საკუთარ ნახევრად გამტარში ფერმის დონე გადის აკრძალული ზონის შუაში.

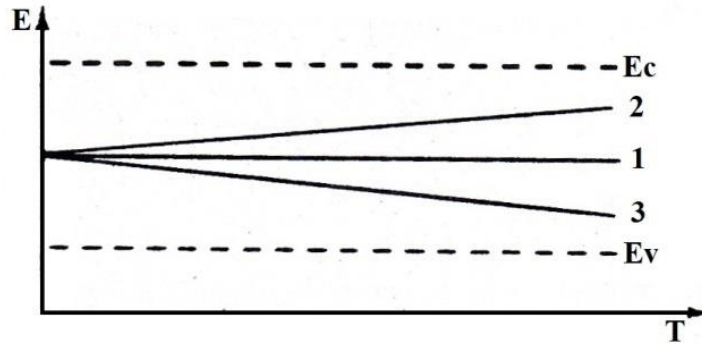
ფერმის ენერჯიის ტემპერატურული დამოკიდებულება მეორე შესაკრებით განისაზღვრება. ეს დამოკიდებულება წრფივი ხასიათისაა. ამავე დროს, ამ წრფივი დამოკიდებულების კონკრეტული სახე განისაზღვრება იმით, თუ როგორია თანაფარდობა ელექტრონისა და ხვრელის მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტურ მასებს შორის (ნახ. 3.3) განვიხილოთ სამი ძირითადი შემთხვევა:

1. $m_{dn}^* = m_{dp}^*$, მაშინ ფერმის ენერჯია ტემპერატურისაგან დამოუკიდებელია და ნებისმიერ ტემპერატურაზე მდებარეობს აკრძალული ზონის შუაში (ნახ. 3.3.1).
2. $m_{dp}^* > m_{dn}^*$ ფერმის დონე წრფივად უახლოვდება გამტარობის ზონის ძირს ნახ. 3.3.2 (რეალურად სწორედ ეს პირობა სრულდება ნახევრად გამტარებში).
3. $m_{dp}^* < m_{dn}^*$ - იგი წრფივად უახლოვდება სავალენტო ზონის ჭერს (ნახ. 3.3.3).

გამოვიყენოთ ელექტრონიტრალობის (3.71) პირობა და დავამყაროთ კავშირი დაშვებულ ზონაში მუხტის გადამტანების კონცენტრაციასა და ნახევრად გამტარის ძირითად მახასიათებელ პარამეტრებს შორის. ამისათვის (3.71)-დან გამომდინარე, (3.58) და (3.59)-ის გათვალისწინებით ჩავწეროთ ასეთი გამოსახულება:

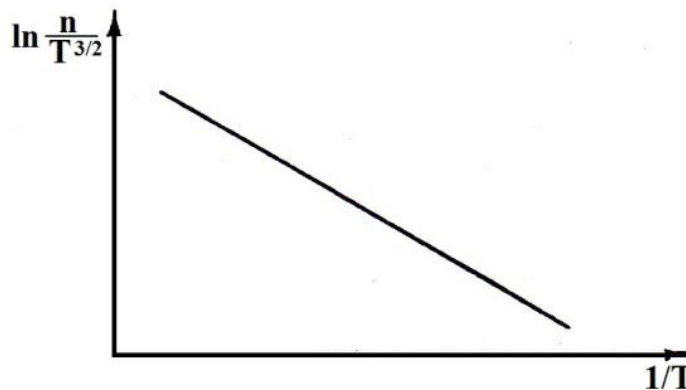
$$n = (np)^{\frac{1}{2}} = (\rho_c^* \rho_v^*)^{\frac{1}{2}} (e^\eta e^{-\eta - \epsilon_g})^{\frac{1}{2}}, \quad (3.73)$$

$$n = 2 \left(\frac{2\pi K_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_{dn}^* \cdot m_{dp}^*)^{\frac{3}{4}} T^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\Delta E_g}{2k_0T}}. \quad (3.74)$$



ნახ. 3.3. საკუთარ ნახევრად გამტარში ფერმის დონის ტემპერატურული დამოკიდებულების გრაფიკი

იმისათვის, რომ (3.74) გამოსახულებაზე დაყრდნობით განესაზღვროთ აკრძალული ზონის სიგანე, ექსპერიმენტულად უნდა დავადგინოთ სხვადასხვა ტემპერატურაზე კონცენტრაციის მნიშვნელობები და ავაგოთ გრაფიკი შებრუნებულ ტემპერატურასა და $\ln \frac{n}{T^{3/2}}$ შორის (ნახ. 3.4). ამ დამოკიდებულებამ უნდა მოგვცეს წრფე, რომლის დახრილობა აკრძალული ზონის სიგანით განისაზღვრება.



ნახ. 3.4. მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება საკუთარი ნახევრად გამტარის შემთხვევაში

თუ გავითვალისწინებთ, რომ თავად აკრძალული ზონის სიგანე დამოკიდებულია ტემპერატურაზე, მაშინ 0K-ზე მისი სიდიდის $(\Delta E_g(0))$ დასადგენად ნებისმიერ ტემპერატურაზე $\Delta E_g(T)$ წარმოვადგინოთ შემდეგნაირად:

$$\Delta E_g(T) = \Delta E_g(0) + \alpha T, \quad (3.75)$$

სადაც α აკრძალული ზონის სიგანის ცვლილების ტემპერატურული კოეფიციენტია

$$\alpha = \frac{d(\Delta E_g)}{dT} \quad (3.76)$$

და ნახევრად გამტარებისათვის მისი რიცხვითი მნიშვნელობა ძირითადად იცვლება $(1 - 5) \times 10^{-4}$ ევ/კ ფარგლებში. (3.75) გამოსახულების გათვალისწინებით (3.74)-ში მივიღებთ.

$$\ln(nT^{-\frac{3}{2}}) = C + \frac{\alpha}{2K} - \frac{\Delta E_g(0)}{2K} \frac{1}{T}, \quad (3.77)$$

რომელიც საშუალებას გვაძლევს გრაფიკული ანალიზის შედეგად დავადგინოთ აკრძალული ზონის სიგანე საკუთარ ნახევრად გამტარში 0K ტემპერატურაზე.

3.6. ფერმის დონე მინარეულ ნახევრად გამტარში

განვიხილოთ n ტიპის გადაუგვარებელი ნახევრად გამტარი. დავადგინოთ ფერმის დონის მდებარეობა ასეთ ნახევრად გამტარში და გავავრცელოთ მიღებული შედეგები p ტიპის ნახევრად გამტარზე. განხილვა ჩავატაროთ ელექტრონიტრალობის განტოლების საფუძველზე

$$n = N_D^+ + p \quad (3.78)$$

N_D^+ – იონიზირებული დონორების

$$N_D^+ = N_D - n_D \quad (3.79)$$

N_D – მინარეული დონეების, ხოლო n_D – დონორულ დონეებზე ელექტრონების კონცენტრაციებია.

იმისათვის, რომ მარტივად გადავწყვიტოთ დასმული ამოცანა, შემოვიფარგლოთ დაბალი ტემპერატურებით $k_0T \ll \Delta E_g$. ამ შემთხვევაში ელექტრონების აღზნება სავალენტო ზონიდან არ მოხდება (ე.ი. $p = 0$ და (3.78) და (3.79) გამოსახულებების გათვალისწინებით ელექტრონიტრალობის პირობა მიიღებს შემდეგ სახეს:

$$n = N_D - n_D, \quad (3.80)$$

თუ გავითვალისწინებთ ლოკალურ დონეზე მუხტის გადამტანების გამოსაანგარიშებელ ფორმულას დონორული დონის შემთხვევაში (3.69), მაშინ ელექტრონიტრალობის ფორმულა გარდაიქმნება შემდეგნაირად:

$$n = N_D - \frac{N_D}{1+0.5\exp(-\epsilon_D-\eta)} = \frac{N_D}{1+2\exp(\epsilon_D+\eta)} \quad (3.81)$$

ტემპერატურა T იმდენად დაბალი განვიხილოთ, რომ $k_0T \ll F + E_D$ ე.ი. $e^{\epsilon_D+\eta} = e^{\frac{E_D+F}{k_0T}} \gg 1$ მაშინ,

$$n = \frac{1}{2}N_De^{-\epsilon_D-\eta} \quad (3.82)$$

(3.82) და (3.58) გამოსახულებების გათვალისწინებით

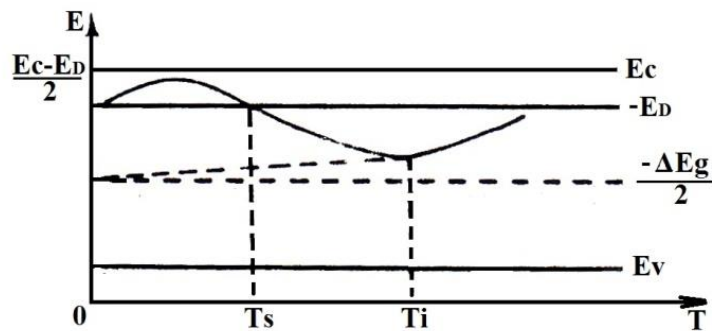
$$e^{2\eta} = \frac{N_D}{2\rho_C^*} e^{-\varepsilon_D} \quad (3.83)$$

და შესაბამისად ფერმის ენერჯისათვის გვექნება

$$\eta = -\frac{\varepsilon_D}{2} + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{N_D}{2\rho_C^*}\right) \quad (3.84)$$

$$F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{1}{2} k_0 T \ln \frac{N_D}{2\rho_C^*} \quad (3.85)$$

(3.85) ფორმულიდან ჩანს, რომ მინარეულ ნახევრად გამტარში ფერმის დონესა და ტემპერატურას შორის კავშირი საკმაოდ რთულია, ვინაიდან წრფივი და ლოგარითული დამოკიდებულებების წვევები (ტემპერატურა შედის ρ_C^* გამოსახულებაშიც) მოქმედებენ ერთმანეთის საპირისპიროდ (ნახ. 3.5).



ნახ. 3.5. ფერმის დონის მდებარეობის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება დონორული ნახევრად გამტარებისათვის

გრაფიკზე შეიძლება გამოიყოს სამი ტემპერატურული ინტერვალი:

I. $0K$ -დან იმ T_S ტემპერატურამდე, სადაც ფერმის დონე გადაკვეთს დონორულ დონეს. ეს ტემპერატურების ის არეა, სადაც მინარევის იონიზაცია ჯერ კიდევ სუსტია. მას მინარევის გაყინვის არეს უწოდებენ. ამ არეში $n \ll N_D$ და სამართლიანია (3.85) ფორმულა.

II. იწყება იმ T_S ტემპერატურით, რომლის დროსაც დაიონებული მინარეების რიცხვი დაახლოებით მესამედია $n_D \approx \frac{2}{3} N_D$

$$T_S = \frac{E_C - E_D}{k_0 \ln \frac{\rho_C^*}{N_D}} \quad (3.86)$$

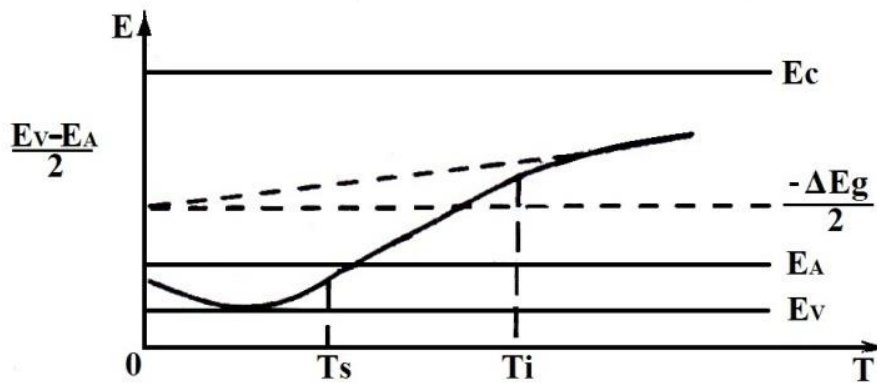
და მთავრდება T_i ტემპერატურით, რომელზეც იწყება საკუთარი გამტარობა. ამ ინტერვალს მინარევის გამოფიტვის არეს უწოდებენ.

III. ინტერვალი-საკუთარი გამტარობის არე $-k_0 T \sim \Delta E_g$, ე.ი. $n > N_D$ და ფერმის ენერჯის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება იმეორებს საკუთარ ნახევრად გამტარში ამ დამოკიდებულების სახეს. საკუთარი გამტარობის ინტერვალის საწყისი ტემპერატურა

$$T_i = \frac{\Delta E_g}{k_0 \ln \frac{\rho_C \rho_V^*}{N_D^2}} \quad (3.87)$$

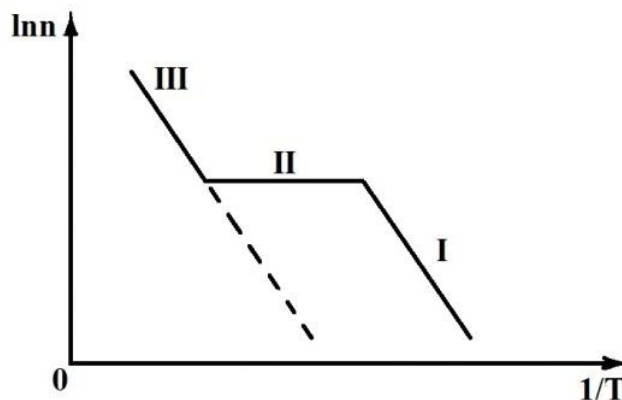
ანალოგიურია ფერმის ღონის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება აქცეპტორულ ნახევრად გამტარში (ნახ. 3.6).

როგორც საკუთარ, ასევე n და p ტიპის ნახევრად გამტარებში კონცენტრაციის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება შეგვიძლია გამოვიყენოთ ენერგეტიკული ღრეხოს, ამ შემთხვევაში ღონორის ან აქცეპტორის იონიზაციის ენერჯის დასადგენად: n ტიპის ნახევრად გამტარებისათვის (თუ $N_A = 0$), როდესაც $T \leq T_S n = B e^{-\frac{E_D}{2k_0 T}}$; p ტიპის ნახევრად გამტარებისათვის (თუ $N_D = 0$), როდესაც $T \leq T_S p = B e^{-\frac{E_A}{2k_0 T}}$.



ნახ. 3.6. ფერმის ღონის მდებარეობის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება აქცეპტორული ნახევრად გამტარებისათვის

თუ ავაგებთ გრაფიკს ექსპერიმენტულად განსაზღვრულ ელექტრონების ან ხვრელების კონცენტრაციის ლოგარითმსა და შებრუნებულ ტემპერატურას შორის, მაშინ გრაფიკის დახრილობა განსაზღვრავს მინარევის იონიზაციის ენერჯიას (ნახ. 3.7.)



ნახ. 3.7. მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება მინერეული ნახევრად გამტარებისათვის

აღნიშნულ დამოკიდებულებაში შეიძლება გამოვეყნოთ სამი ძირითადი უბანი:

I. უბანი (დაბალი ტემპარატურის არე) – მინარევის იონიზაციის უბანი. კონცენტრაცია იზრდება ელექტრონების დონორული დონიდან გამტარობის ზონაში გადასვლის ხარჯზე;

II. – შუალედური ტემპერატურების უბანი. ტემპერატურა იმდენად მაღალია, რომ მინარევი მთლიანად გამოფიტულია, მაგრამ ამავე დროს არ არის საკმარისი იმისათვის, რომ სავალენტო ზონიდან მოხდეს ელექტრონების ადგზნება გამტარობის ზონაში. ამიტომაც კონცენტრაცია მუდმივი რჩება.

III. – საკუთარი გამტარობის უბანი. ტემპერატურა ისეთია, რომ ადგილი აქვს სავალენტო ზონიდან გამტარობის ზონაში ელექტრონების გადასვლას და კონცენტრაცია სწრაფად იზრდება. წყვეტილი ხაზი შეესაბამება შემთხვევას, როდესაც მინარევის კონცენტრაცია ნულის ტოლია.

თაზო IV

მუხტის გადამტანების ბაზნევა

4.1 გაბნევის პროცესის მახასიათებელი პარამეტრები

იდეალურ კრისტალში, რომლის მესერი მთლიანად თავისუფალია დეფექტებისაგან, გარკვეული გარეშე ზემოქმედებით აღძრული მუხტის გადამტანების მიმართული მოძრაობა შენარჩუნებული იქნება ზემოქმედების შეწყვეტის შემდეგაც. რეალურ კრისტალში კი არსებული დეფექტები განაპირობებენ საწყისი წონასწორული პირობების სწრაფ ($\sim 10^{-13}$ წმ) აღდგენას. ეს პროცესი აიწერება მუხტის გადამტანების განაწილების ისეთი ფუნქციით, რომელიც უკვე დამოკიდებულია ენერგიაზე (\vec{k} -ზე), დროზე და კოორდინატზე $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$.

განაწილების ფუნქციის დროის მიხედვით ცვლილება ემორჩილება ბოლცმანის კინეტიკურ განტოლებას

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i, \quad (4.1)$$

რომლის მიხედვითაც ეს ცვლილება შეიძლება გამოწვეული იყოს როგორც გარეშე ზემოქმედებით $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e$, ასევე შიგა ზემოქმედებით – მუხტის გადამტანების მესრის დეფექტებთან ურთიერთქმედებით $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i$.

სტაციონარულ პირობებში – როდესაც ფიზიკური პროცესების მახასიათებელი პარამეტრები დროზე არ არის დამოკიდებული, განაწილების ფუნქციის ცვლილებას ადგილი არ აქვს $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ და ე.ი.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_e = -\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i \quad (4.2)$$

მაშასადამე, სტაციონარულ მდგომარეობაში გარეშე ზემოქმედებით გამოწვეული განაწილების ფუნქციის ცვლილება კომპენსირდება მუხტის გადამტანების მესრის დეფექტთან ურთიერთქმედებით განპირობებული განაწილების ფუნქციის ცვლილებით. ეს უკანასკნელი უზრუნველყოფს, აგრეთვე განაწილების ფუნქციის წონასწორული მნიშვნელობის სწრაფ აღდგენას, როდესაც წყდება კრისტალზე გარედან ზემოქმედება ე.ი. (4.1)-დან.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_i \quad (4.3)$$

და თანაც განაწილების ფუნქციის ამ ცვლილების სისწრაფე მით მეტია, რაც უფრო მკვეთრად იყო გამოხატული სისტემის წონასწორული მდგომარეობიდან გადახრა

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f-f_0}{\tau(\vec{k}, \vec{r})}. \quad (4.4)$$

განაწილების ფუნქციის მყისი მნიშვნელობა განისაზღვრება ექსპონენციალური დამოკიდებულებიდან, რომელიც მიიღება (4.4) განტოლების ამოხსნით

$$f - f_0 = (f - f_0)|_{t=0} \cdot e^{-\frac{t}{\tau(\vec{k}, \vec{r})}} \quad (4.5)$$

პროცესის მახასიათებელი კოეფიციენტი $\tau(\vec{k}, \vec{r})$ განსაზღვრავს იმ დროს, რომლის განმავლობაშიც $f - f_0$ ცვლილება მცირდება e -ჯერ (e ნეპერის რიცხვია). მაშასადამე, $\tau(\vec{k}, \vec{r})^*$ გვიჩვენებს თუ რამდენად სწრაფად უბრუნდება სისტემა წონასწორულ მდგომარეობას, ე.ი. თავისი ფიზიკური შინაარსით იგი ფაქტიურად რელაქსაციის დროს წარმოადგენს (რელაქსაციის დრო – სითბური წონასწორობის მდგომარეობიდან გამოყვანილი სისტემის წონასწორულ მდგომარეობაში დაბრუნების საშუალო დროა). ამავე დროს, უნდა აღინიშნოს, რომ τ ახასიათებს მუხტის გადამტანების მესრის დეფექტებთან ურთიერთქმედების პროცესს არა მარტო რელაქსაციისას, არამედ გარეშე ძალთა მოქმედების პირობებშიც.

ვინაიდან განაწილების ფუნქცია ჩაიწერება ერთდროულად განსაზღვრული ტალღური ვექტორისა და კოორდინატის მეშვეობით, ამიტომ ბოლცმანის კინეტიკური განტოლება კვაზიკლასიკურ განტოლებას წარმოადგენს და მისი გამოყენება შეიძლება ისეთი პროცესებისათვის, რომლებისთვისაც აზრი აქვს თავისუფალი განარბენის სიგრძის ცნებას, ანუ მუხტის გადამტანების თავისუფალი განარბების საშუალო სიგრძე უნდა აღემატებოდეს დე ბროილის ტალღის სიგრძეს. რადგანაც წონასწორული მდგომარეობის აღსადგენად საკმარისია მუხტის გადამტანის დეფექტთან 1-3 ურთიერთქმედება (დაჯახება), ამიტომ რელაქსაციის დრო შეიძლება გავუტოლოთ ორ დაჯახებას შორის დროს და ე.ი.

$$\tau = \frac{l}{v_0}. \quad (4.6)$$

დეფექტთან ურთიერთქმედებას, რომლის შედეგადაც ადგილი აქვს მუხტის გადამტანების მოძრაობის პირობების ცვლილებას, უწოდებენ გაბნევას, ხოლო ნებისმიერი სახის დეფექტს, რომელზედაც მიმდინარეობს გაბნევა – გაბნევის ცენტრი ეწოდება. გაბნევის ცენტრი შეიძლება იყოს სტატიკური ან დინამიური: უმრავლესობა სტატიკური ცენტრებია (ფორები, ნაპრალები, დისლოკაციები ვაკანსიები). ამავე დროს, გაბნევის ცენტრის ყველაზე მნიშვნელოვანი სახე სწორედ დინამიური ცენტრია. ესაა მესრის ატომების სითბური რხევა. თუ გავითვა-

* შემდგომში $\tau(\vec{k}, \vec{r})$ -ის ნაცვლად გამოვიყენებთ აღნიშვნას τ , თუმცა მისი დამოკიდებულება ენერგიაზე პრაქტიკულად ყველგან იქნება გათვალისწინებული.

ლისწინებთ, რომ ურთიერთქმედება მუხტის გადამტანსა და გაბნევის ცენტრს შორის მიმდინარეობს ძალიან მცირე დროის განმავლობაში ($\Delta t \approx 10^{-14}$ წმ), და მხოლოდ მაშინ, როცა მათ შორის მანძილი მცირეა ($b \approx 10^{-7}$ სმ), ცხადი გახდება, რომ მნიშვნელოვან ცვლილებას ასწრებს მხოლოდ სიჩქარე და კვაზიიმპულსი. ამდენად, მართლაც შეიძლება გატარდეს ანალოგია მუხტის გადამტანის ტრაექტორიის ცვლილების და მექანიკაში დაჯახების (დარტემის) პროცესებს შორის.

გაბნევის პროცესის დასახასიათებლად შეიძლება გამოვიყენოთ τ -რელაქსაციის დრო, l -თავისუფალი განარბენის სიგრძე, w -გაბნევის ალბათობა, σ -გაბნევის ეფექტური კვეთი. ამ უკანასკნელი პარამეტრის შემოტანა შემდეგი მოსაზრებით არის გამოწვეული: გაბნევის დროს არ არის აუცილებელი მუხტის გადამტანის გაბნევის ცენტრებთან მართლაც უშუალო დაჯახება, თუ მუხტის გადამტანი მოძრაობისას აღმოჩნდება დამუხტული ცენტრის მახლობლად, მათ შორის აღიქვრება კულონური ურთიერთქმედება, რაც გამოიწვევს მუხტის გადამტანის ტრაექტორიის ცვლილებას. მაშასადამე, თითოეული გაბნევის ცენტრის ირგვლივ შეიძლება გამოიყოს არე, რომელშიც მოხვედრისას იგრძნობა მუხტის გადამტანებზე გაბნევის ცენტრის ზემოქმედება და სწორედ მისი ჭრილის ფართობს გაბნევის ეფექტურ კვეთს უწოდებენ.

დავამყაროთ კავშირი გაბნევის მახასიათებელ პარამეტრებს შორის. განვიხილოთ n კონცენტრაციის ელექტრონების სიმრავლე, რომელიც მოძრაობს V_0 სიჩქარით. გვექნება nV_0 სიმკვრივის ელექტრონების ნაკადი. ვთქვათ, ამ ნაკადის გზაზე განლაგებულია N გაბნევის ცენტრი, რომლებზეც დროის ერთეულში განიბნევა ელექტრონების n_1 რაოდენობა. n_1 მით მეტი იქნება, რაც უფრო დიდია ელექტრონების ნაკადი და გაბნევის ცენტრების რაოდენობა მათ გზაზე.

$$n_1 = \sigma n V_0 N. \quad (4.7)$$

(4.7) გამოსახულებიდან გაბნევის ეფექტური კვეთისათვის გვექნება:

$$\sigma = \frac{n_1}{n V_0 N}, \quad (4.8)$$

მაშასადამე, გაბნევის ეფექტური კვეთი გვიჩვენებს გაბნევის ერთ ცენტრზე ელექტრონების ერთეულოვანი სიმკვრივის ნაკადიდან დროის ერთეულში გაბნეული ელექტრონების რიცხვს.

მეორეს მხრივ, გაბნეული ელექტრონების რიცხვი შეიძლება ჩაიწეროს გაბნევის ალბათობის გამოყენებითაც

$$n_1 = w n, \quad (4.9)$$

თუ ამ უკანასკნელს გავითვალისწინებთ (4.8) გამოსახულებაში, მაშინ

$$\sigma = \frac{w}{NV_0}, \quad (4.10)$$

ე.ი. გაბნევის ეფექტური კვეთი გვიჩვენებს გაბნევის ერთ ცენტრზე ერთეულოვანი სიჩქარით მოძრავი ელექტრონის გაბნევის ალბათობას.

ამავე დროს, გაბნევის ალბათობა თავისუფალი განარბენის დროის შებრუნებული სიდიდეა, რადგანაც, რაც მცირეა დაჯახებებს შორის დრო, მით მეტია გაბნევის ალბათობა

$$w = \frac{1}{\tau} = \frac{V_0}{l}. \quad (4.11)$$

თუ (4.11) გამოსახულებას გავითვალისწინებთ (4.10)-ში, მაშინ მივიღებთ ფორმულას, რომელიც განსაზღვრავს განარბენის ერთეულოვან სიგრძეზე გაბნევის ალბათობას.

$$w^* = l^{-1} = \sigma N. \quad (4.12)$$

ნახევრად გამტარებში ერთდროულად შეიძლება მოქმედებდეს გაბნევის რამოდენიმე მექანიზმი. მათ შორის უფრო ხშირად გვხვდება გაბნევა ნეიტრალურ მინარევეებზე და მესრის სითბურ რხევებზე. გაბნევის მახასიათებელი პარამეტრებისათვის სამართლიანია ადიტიურობის პირობა (გაბნევის პროცესების დამოუკიდებლობის გათვალისწინებით):

$$\{ \sigma = \sum_i \sigma_i; w = \sum_i w_i; l^{-1} = \sum_i l^{-1}_i; \tau^{-1} = \sum_i \tau^{-1}_i \} \quad (4.13)$$

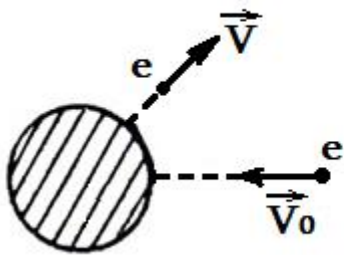
(4.13) გამოსახულების თანახმად, თავისუფალი განარბენის სრული სიგრძე ყოველთვის ნაკლებია ყველაზე მცირე პარციალური თავისუფალი განარბენის სიგრძეზე და გაბნევის პროცესში ძირითად წვლილს იძლევა ის მექანიზმი, რომელსაც უმცირესი რელაქსაციის დრო შეესაბამება.

4.2 გაბნევა ნეიტრალურ და დაიონებულ მინარევეებზე

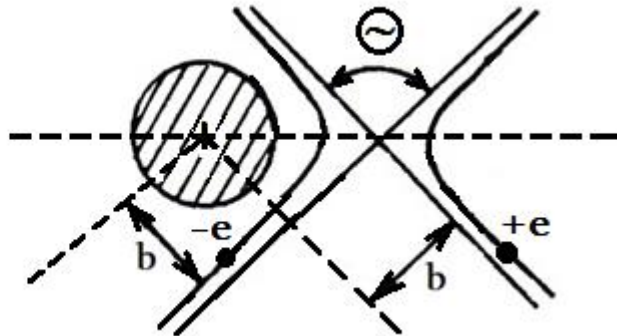
წერტილოვან დეფექტებს შორის გაბნევის პროცესში მნიშვნელოვან როლს თამაშობს მინარეული ატომი. ვინაიდან კრისტალის ტემპერატურის ცვლილებასთან ერთად იცვლება მინარეული ატომის მდგომარეობა, განხვავებული იქნება მისი მონაწილეობაც გაბნევის პროცესში. ჯერ განვიხილოთ გაბნევა ნეიტრალურ მინარეულ ატომზე.

მინარევი ნეიტრალურ მდგომარეობაშია დაბალ ტემპერატურაზე (როცა k_0T გაცილებით ნაკლებია მინარეული ატომის იონიზაციის ენერგიაზე). ნეიტრალური მინარეული ატომი ელექტრულ ველს არ ქმნის და ამდენად, მუხტის გადამტანის

გაბნევა ნეიტრალურ ატომზე შეიძლება მართლაც განვიხილოთ როგორც უშუალოდ დაჯახების შედეგი: \vec{V}_0 სიჩქარით მოძრავი ელექტრონი ეჯახება მინარეულ ატომს, შთაინთქმება მის მიერ და შთანთქმული ელექტრონის ენერგია ხმარდება სხვა ელექტრონის გამონთავისუფლებას. ვინაიდან ეს ორი ელექტრონი არაფრით არ განსხვავდება ერთმანეთისაგან, პროცესი განიხილება როგორც ელექტრონის მოძრაობის ტრაექტორიის ცვლილება (ნახ. 4.1). რეალურად სურათი უფრო რთულია:



ნახ. 4.1. ელექტრონის ნეიტრალურ მინარეულ ატომზე გაბნევის სქემა



ნახ. 4.2. ელექტრონის და ხერვლის გაბნევა მინარეულ დადებით იონზე

ელექტრონი უახლოვდება რა ნეიტრალურ მინარეულ ატომს, განაპირობებს მის პოლარიზაციას – აღიძვრება კულონური ურთიერთქმედება მოძრავ ელექტრონსა და გაჩენილ დიპოლს შორის, რაც ზეგავლენას ახდენს ტრაექტორიის ფორმაზე. ელექტრონული გაცვლისა და პოლარიზაციის გათვალისწინებით რელაქსაციის დროისათვის გვექნება

$$\tau = \frac{m^*2e^2}{20\hbar^3\varepsilon^*N_0} \quad (4.14)$$

ε^* – დიელექტრიკული შეღწევადობაა, N_0 – ნეიტრალური მინარეული ატომების კონცენტრაცია მოცემულ ტემპერატურაზე. τ არ არის დამოკიდებული კრისტალის ტემპერატურასა და მუხტის გადამტანების ენერგიაზე. თუმცა ტემპერატურის გავლენა გამოძულებულია ტემპერატურის მომატებისას, როდესაც მინარეული ატომების იონიზაციის გამო, შემცირდება ნეიტრალურ მდგომარეობაში მყოფი ატომების რაოდენობა. ტემპერატურის შემდგომი ზრდისას მუხტის გადამტანების გაბნევა ძირითადად განხორციელდება დაიონებულ მინარეულ ატომებზე. აქ უკვე გაბნევა კულონური ურთიერთქმედებით არის განპირობებული, რომელიც აღიძვრება მუხტის გადამტანსა და იონს შორის (ნახ. 4.2), სადაც θ მუხტის გადამტანის გაბნევის კუთხეა (ტრაექტორიის შემობრუნების კუთხე); ხოლო b -ს სამიზნე მანძილს

უწოდებენ და ის განსაზღვრავს გაბნევის ცენტრსა და მუხტის გადამტანის ტრაექტორიას შორის მინიმალურ მანძილს.

მუხტის გადამტანის დაიონებულ მინარევეებზე გაბნევის დამახასიათებელი რელაქსაციის დრო დამოკიდებულია ტემპერატურაზე და ენერგიაზე

$$\tau = \tau_0 T^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{3}{2}}, \quad (4.15)$$

სადაც

$$\tau_0 = \frac{\varepsilon^{*2} \sqrt{2m^* k^{\frac{3}{2}}}}{ne^4 N_1 g(\eta)}. \quad (4.16)$$

აქ ε^* კრისტალის დიელექტრიკული შეღწევადობაა, ხოლო

$$g(\eta) = \ln(1 + \eta) = \frac{\eta}{1 + \eta}. \quad (4.17)$$

გაბნევა დაიონებულ მინარევეებზე გაბნევის ძირითად მექანიზმად გვევლინება გარკვეულ, შუალედურ ტემპერატურულ ინტერვალში. შედარებით მაღალ ტემპერატურებზე პრიორიტეტული ხდება უკვე გაბნევა მესრის სითბურ რხევებზე.

4.3. მესრის სითბური რხევები.

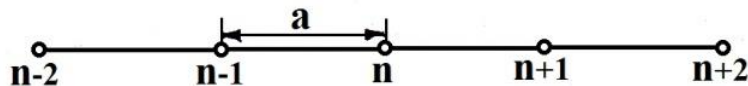
ფონონების სტატისტიკის ელემენტები.

ვიდრე განვიხილავდეთ გაბნევას მესრის სითბურ რხევებზე, გავეცნოთ თვით სითბური რხევების პროცესს და შემოვიტანოთ ფონონის ცნება.

ჯერ განვიხილოთ უმარტივესი კრისტალი. ეს იქნება ერთი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი ჯაჭვი (ნახ. 4.3). სითბური რხევისას ატომის გადახრა წონასწორული მდგომარეობიდან შეიძლება ჩაითვალოს საკმაოდ მცირედ და მაშინ, ჰუკის კანონის თანახმად

$$X_n = \frac{F_n}{C}, \quad (4.18)$$

სადაც F_n არის n -ურ ატომზე $n - 1$ და $n + 1$ ატომების მხრიდან მოქმედი ძალების ტოლქმედი; C – ნივთიერების დრეკადობის კოეფიციენტი.



ნახ. 4.3. ერთი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი მესრის სქემატური გამოსახულება

ასეთი ჯაჭვისათვის ატომის წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის გამოსაანგარიშებლად შეიძლება დავეყრდნოთ სიმის რხევის თეორიას (ატომური ჯაჭვის დისკრეტულობის გათვალისწინებით)

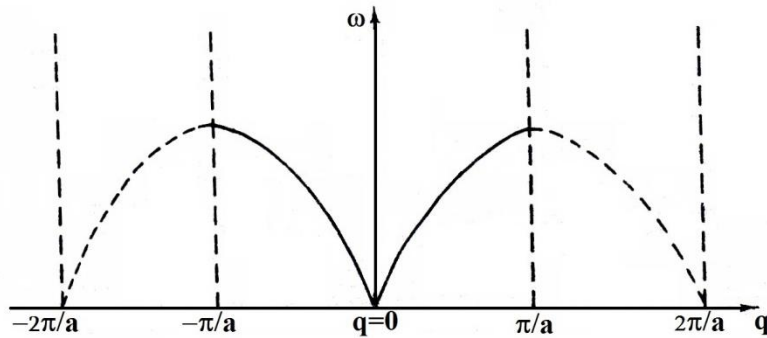
$$X_n = Ae^{i(qan - \omega t)}, \quad (4.19)$$

სადაც A რხევის ამოლიტუდაა, ω -ციკლური სიხშირე; q -მესრის შემაღგენელი ატომების სითბური რხევისას კრისტალში აღძრული დრეკადი ტალღის ტალღური რიცხვი. მოძრაობის განტოლებაში (4.19)-ის გათვალისწინებით და განტოლების მესრის სითბური რხევების ციკლური სიხშირის მიმართ ამოხსნით გვექნება

$$\omega = 2\sqrt{\frac{c}{M}} \sin \frac{qa}{2}. \quad (4.20)$$

აქ M ატომის მასაა. (4.20) გამოსახულება განსაზღვრავს $\omega(q)$ დამოკიდებულებას და მესრის სითბური რხევებისათვის დისპერსიის კანონს წარმოადგენს. (4.20) გამოსახულების პერიოდულობიდან ჩანს (ნახ. 4.4), რომ საკმარისია შემოვიფარგლოთ q -ს მნიშვნელობათა შემდეგი დისკრეტული სიმრავლით:

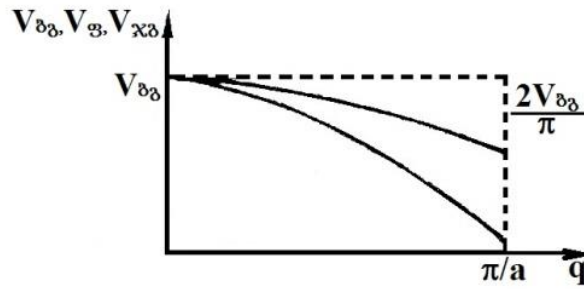
$$-\frac{\pi}{a} \leq q < \frac{\pi}{a}. \quad (4.21)$$



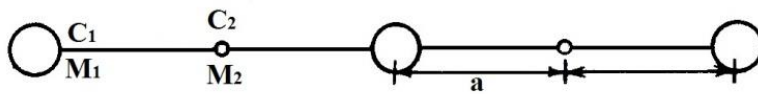
ნახ. 4.4. რხევის სიხშირის დამოკიდებულება ტალღურ რიცხვზე ერთი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი მესრისათვის

ტალღის სიხშირის ტალღურ რიცხვზე დამოკიდებულება ნიშნავს, რომ q -ზე დამოკიდებული იქნება ტალღის გავრცელების სიჩქარეც, თანაც ეს დამოკიდებულება სხვადასხვანაირი იქნება ფაზური და ჯგუფური სიჩქარეებისათვის (ფაზური სიჩქარე არის ტალღის ფაზის გავრცელების სიჩქარე $V_{ფ} = \frac{\omega}{q}$. ჯგუფური – ტალღის ენერჯიის გადატანის სიჩქარე $V_{ჯგ} = \frac{\partial \omega}{\partial q}$. გრძელი ტალღებისათვის, ე.ი. q -ს მცირე მნიშვნელობებისათვის ($q \approx 0$) ფაზური და ჯგუფური სიჩქარეები ერთმანეთს უტოლდება და კრისტალში ბგერის გავრცელების სიჩქარით განისაზღვრება, ეს კი ნიშნავს, რომ აღნიშნულ შემთხვევაში ერთატომიანი ჯაჭვი იქცევა ისევე, როგორც უწყვეტი სისტემა. მოკლე ტალღების შემთხვევაში ($q = \pm \frac{\pi}{a}$) ჯგუფური სიჩქარე ნულისაკენ მიისწრაფის, ხოლო ფაზური სიჩქარე $-2 \frac{V_{ფ}}{\pi}$ მნიშვნელობისაკენ (ნახ. 4.5.) მაშასადამე, ტალღის სიგრძის შემცირებისას სითბური რხევის კვანტის ენერჯია

ხდება იმდენად დიდი, რომ კრისტალს მისი ათვისება აღარ შეუძლია და ასეთი ენერჯის გადატანას კრისტალში ადგილი არა აქვს.



ნახ. 4.5. ფაზური და ჯგუფური სიხარების დამოკიდებულება ტალღურ რიცხვზე



ნახ. 4.6. ორი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი მესრის სქემატური გამოსახულება

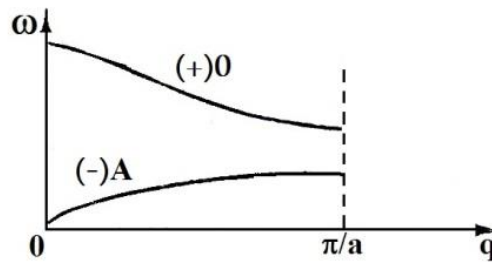
განვიხილოთ ორი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი ჯაჭვი (ნახ. 4.6.) თუ ასეთი ჯაჭვისათვის კვლავ განვიხილავთ მოძრაობის განტოლებას აღმოჩნდება, რომ რხევის სიხშირისათვის გვექნება ორი ამონახსნი

$$\omega_{1,2} = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \left(1 \pm \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right)} \right); \quad (4.22)$$

$$\omega_0^2 = \frac{(C_1 + C_2)(M_1 + M_2)}{M_1 M_2}; \quad (4.23)$$

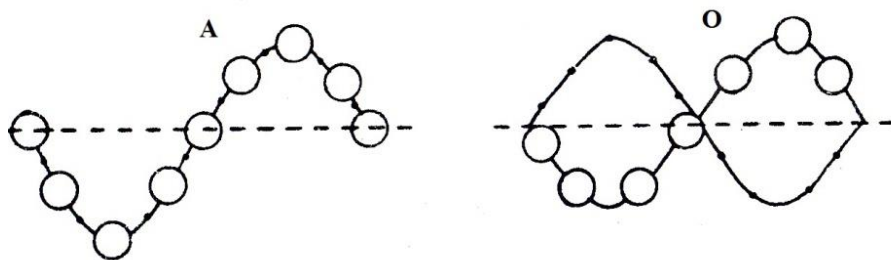
$$\gamma = \frac{C_1 C_2}{(C_1 + C_2)^2} \frac{M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}. \quad (4.24)$$

(4.22) გამოსახულებიდან გამომდინარე, ორი ტიპის ატომებისაგან შემდგარ ჯაჭვში შესაძლებელია ორგვარი რხევის აღძვრა: ერთს შეესება "−" ნიშანი, მეორეს "+" ნიშანი. ამ ორ რხევას შორის განსხვავება ყველაზე დიდი იქნება $q = 0$ მნიშვნელობისათვის (ნახ. 4.7.)



ნახ. 4.7. ორი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ერთგანზომილებიანი ჯაჭვის სიბრტყითი რხევის ოპტიკური და აკუსტიკური შტო

იმ ტიპის რხევებს, რომლებსაც (4.22)-ში – "-" ნიშანი შეესაბამება, აკუსტიკურს უწოდებენ, ვინაიდან ასეთი სახის რხევები აღიძვრება კრისტალში ბგერითი ტალღის გავრცელებისას. რხევებს, რომელთაც "+" ნიშანი შეესაბამებათ, ოპტიკურს უწოდებენ. ეს იმ გარემოებასთანაა დაკავშირებული, რომ სწორედ აღნიშნული ტიპის რხევები ახდენენ ზეგავლენას ინფრაწითელი სხივების შთანთქმასა და გამოსხივებაზე. თუ შევძლებთ კრისტალური მესრის თვალნათლივ წარმოდგენას ორი ტიპის ატომებისაგან შემდგარი ჯაჭვის შემთხვევაში, ცხადად გამოვლინდება ის პრინციპული განსხვავება, რომელიც არსებობს აკუსტიკურ და ოპტიკურ რხევებს შორის, აკუსტიკური რხევისას ორივე ტიპის ატომები ერთ ფაზაში ირხებიან, ოპტიკურის შემთხვევაში კი – საწინააღმდეგო ფაზაში ნახ. 4.8.

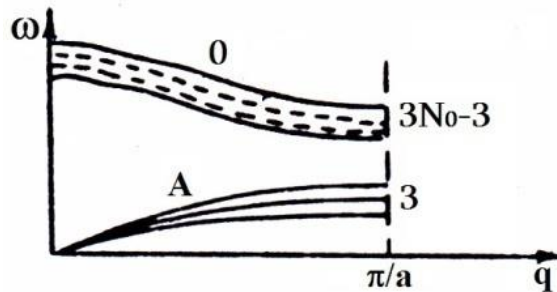


ნახ. 4.8. ორატომიან წრფივ მესერში ოპტიკური და აკუსტიკური რხევების სქემატური გამოსახულება: A-აკუსტიკური რხევები; O-ოპტიკური რხევები

მნიშვნელოვანი განსხვავებაა ტალღის სიჩქარისათვის მესრის ოპტიკური და აკუსტიკური რხევების დროს. კერძოდ, როდესაც $q = 0$ აკუსტიკური ტალღის ფაზური და ჯგუფური სიჩქარეები ერთმანათის და კრისტალში ბგერის გავრცელების სიჩქარის ტოლია, ხოლო ოპტიკური ტალღისათვის $V_{\text{გგ}} = 0$ მაშინ, როდესაც ფაზური სიჩქარე მიისწრაფის უსასრულობისაკენ.

ვინაიდან კრისტალი დისკრეტული სისტემაა, ამიტომ მესრის სიბუხრი რხევების სიხშირეების მნიშვნელობათა სიმრავლედ დისკრეტული იქნება. გავარკვიოთ რხევის რამდენი სიხშირე შეიძლება იყოს ამ დისკრეტულ სიმრავლეში. (4.22)-დან გამომდინარე, თითოეული სიხშირე დაკავშირებულია ტალღური ვექტორის გარკვეულ მნიშვნელობასთან. ეს უკანასკნელი იცვლება $-\frac{\pi}{a}$ -დან $\frac{\pi}{a}$ -მდე და ამ არეში q -ს შესაძლო მნიშვნელობათა რიცხვი და, ამდენად, სიხშირის შესაძლო მინიმალური რაოდენობა ელემენტარული უჯრედების N რიცხვით განისაზღვრება. ამავე დროს, ვინაიდან კრისტალში შესაძლებელია აღიძვრას სხვადასხვა სახის რხევა, ამიტომ თითოეული ტალღური რიცხვისათვის ω -მ შეიძლება მიიღოს სხვადასხვა მნიშვნელობა. შტოთა რაოდენობა $\omega(q)$ დამოკიდებულებაში განისაზღვრება ელემენტარულ უჯრედში N_0 ატომთა რიცხვით. თუ $N_0 = 1$, მაშინ

გვაქვს მხოლოდ სამი აკუსტიკური (A) შტო. თუ $N_0 \geq 2$ გვაქვს სულ $3N_0$ შტო, რომელთაგანაც სამი აკუსტიკურია და $(3N_0 - 3)$ -ოპტიკური (O), (ნახ. 4.9), ე.ი. ბრილუენის ზონის ფარგლებში ω -ს შესაძლო მნიშვნელობათა რიცხვი $3N_0N$ რაოდენობით განისაზღვრება და თანაც არ არის გამორიცხული, რომ ω -ს ზოგიერთი მნიშვნელობა ერთმანეთს დაემთხვეს.



ნახ. 4.9. მესრის სითბური რხევების სპექტრის გრაფიკული გამოსახულება

აღსანიშნავია, აგრეთვე ის გარემოება, რომ აკუსტიკური და ოპტიკური რხევების შემთხვევაში შეიძლება საქმე გვქონდეს როგორც გრძივი (L), ასევე განივი (T) სახის რხევებთან. მაშასადამე, კრისტალში შესაძლებელია სულ ოთხი სახის რხევის არსებობა, რომელთა (შტოთა) რაოდენობა შემდეგნაირად არის განაწილებული:

1. $LA - N$ შტო.
2. $TA - 2N$ შტო
3. $LO - (N_0 - 1)N$ შტო
4. $TO - 2(N_0 - 1)N$ შტო

რხევის გარკვეული სიხშირის არსებობა ნიშნავს, რომ მესერს გააჩნია ამ რხევის შესაბამისი ენერგია

$$E_{gj} = \hbar\omega_j(\vec{q}). \quad (4.25)$$

შესაბამისად, შეგვიძლია ვილაპარაკოთ მესრის ჯამურ ენერგიაზე, რომელიც მას გააჩნია იმის გამო, რომ ამ მესრის შემადგენელი ატომები მონაწილეობენ სხვადასხვა სახის სითბურ რხევებში და გამოსახულება, რომელიც მესრის რხევების სრულ ენერგიას წარმოადგენს შემდეგი სახისაა:

$$E = E_0 + \sum_{q,j} n_{qj} \hbar\omega_j(\vec{q}). \quad (4.26)$$

ამ გამოსახულებაში n_{qj} არის ოსცილაციური კვანტური რიცხვი $n_{qj} = 0, 1, 2, \dots$; და რაც უფრო დიდია რხევის ამპლიტუდა, მით მეტია n -ის მნიშვნელობა.

გავერკვეთ E_0 -ის ფიზიკურ არსში. (4.26) გამოსახულებიდან გამომდინარე, როდესაც $n_{qj} = 0$ ($T = 0K$ -ზე) მაშინ, $E = E_0$ და ეს ენერგია ნულოვანი რხევების

ენერჯის სახელწოდებითაა ცნობილი, ხოლო მისი რიცხვითი მნიშვნელობა ჩაიწერება შემდეგნაირად:

$$E_0 = \sum_{q,j} \frac{1}{2} \hbar \omega_j(\vec{q}). \quad (4.27)$$

q -სა და ω -ს მნიშვნელობები, როგორც ვნახეთ, მხოლოდ დისკრეტულად შეიძლება შეიცვალოს. ეს კი ნიშნავს, რომ ასევე დისკრეტულად შეიცვლება მესრის სითბური ენერჯია და ცვლილების პორციის სიდიდე პროპორციულია $\hbar \omega_j(\vec{q})$ -სი. ამდენად, მოსახერხებელი ხდება კვაზინაწილაკის – ფონონის ცნების შემოტანა, რომელიც ენერჯის ამ პორციის მატარებელი იქნება და დახასიათდება მესრის სითბური რხევების ტალღურ ვექტორზე (\vec{q}) დამოკიდებული იმპულსით:

$$E_{qj} = \hbar \omega_j(\vec{q}) \vec{F}_q = \hbar \vec{q}. \quad (4.28)$$

მაშასადამე, მესრის სითბური რხევების ენერჯის ცვლილება ყოველთვის დაკავშირებული იქნება გარკვეული სახის ფონონების ამა თუ იმ რიცხვის შთანთქმასთან ან გამოსხივებასთან.

ზემოთ განხილულიდან გამომდინარე, მესერში $3N_0N$ რაოდენობის სხვადასხვა სახის (აკუსტიკური და ოპტიკური) ფონონის არსებობაა შესაძლებელი. $0K$ ტემპერატურაზე კრისტალი შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ ცარიელი ყუთის სახით. ამ ყუთის მოცულობა კრისტალის მოცულობის ტოლია და მისი სრული ენერჯია ნულოვანი რხევების ენერჯით (E_0) განისაზღვრება. ტემპერატურის მომატებასთან ერთად ყუთი ნელ-ნელა ივსება სხვადასხვა ფერისა და რაოდენობის ფონონებით. თითოეული ფერი რხევის სხვადასხვა ენერჯიას შეესაბამება. გარკვეული ფერის ფონონების რაოდენობა ოსცილაციური კვანტური რიცხვის ტოლია, ეს უკანასკნელი კი რხევის ამპლიტუდასთან ერთად იზრდება. სისტემის სრული ენერჯია ყველა ფონონების ენერჯიათა ჯამის ტოლია.

რეალურ კრისტალში ელექტრონების მოძრაობასთან ერთად ადგილი ექნება ფონონების მოძრაობასაც. მათი სიმრავლე შეიძლება განვიხილოთ ისეთი აირის სახით, რომლის შემადგენელ ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედება უგულვებელყოფილია, ამავე დროს, მოძრაობის პროცესში შესაძლებელია ფონონის ფონონზე და ელექტრონის ფონონზე გაბნევა. ფონონის ელექტრონთან ურთიერთქმედებისას შესაძლებელი ხდება მათ შორის ენერჯის გაცვლა. ან ელექტრონი გადასცემს ენერჯის ნაწილს მესერს, ან მესრისაგან აიღებს ენერჯის რაღაც პორციას, ე.ი. ელექტრონის ფონონთან ურთიერთქმედებას შეიძლება თან ახლდეს ფონონის გაჩენა ან ელექტრონის მიერ ფონონის შთანთქმა.

როგორც დისპერსიული თანაფარდობიდან (4.22) ჩანს, ოპტიკური ფონონის ენერგია აღემატება აკუსტიკურის ენერგიას და თანაც არსებობს ფონონისათვის მაქსიმალური შესაძლო სიხშირე, რომელიც დამოკიდებულია მესრის მუდმივასა და სითბური რხევების გავრცელების სიჩქარეზე.

$$\omega_{max} = \pi \frac{V}{a} \quad (4.29)$$

სითბური რხევების მაქსიმალური სიხშირის ნაცვლად მიღებულია მახასიათებელი ტემპერატურის – დებაის ტემპერატურის გამოყენება:

$$\theta = \frac{\hbar \omega_{max}(\vec{q})}{k_0} \quad (4.30)$$

ნახევრად გამტარებში $\theta \approx 200 + 700K$ (15+45მეე).

ელექტრონებისაგან განსხვავებით, ფონონები მთელი სპინით ხასიათდება და მათი სიმრავლე ბოზე-აინშტაინის განაწილებას ემორჩილება, მაშინ მოცემულ პირობებში $\omega_j(\vec{q})$ ფონონების საშუალო რიცხვი ტოლია

$$\bar{n}_{qj} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_j(\vec{q})}{k_0 T}\right) - 1} \quad (4.31)$$

4.4. მუხტის გადამტანების გაბნევა მესრის სითბურ რხევებზე

კრისტალში ელექტრონებისა და ფონონების არსებობა მეტად ალბათურს ხდის ელექტრონების ფონონებზე გაბნევას. გაბნევის პროცესს ყოველთვის თან ახლავს ფონონების რიცხვის ცვლილება – ფონონის ან გაჩენა, ან შთანთქმა; სრულდება ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონი; იმ შემთხვევაში, როდესაც ელექტრონი შთანთქმავს ფონონს სამართლიანია თანაფარდობები

$$\left. \begin{aligned} E'(\vec{k}') &= E(\vec{k}) + \hbar \omega_q \\ \vec{k}' &= \vec{k} + \vec{q} \end{aligned} \right\} \quad (4.32)$$

ელექტრონის მიერ ფონონის გამოსხივებისას კი

$$\left. \begin{aligned} E'(\vec{k}') &= E(\vec{k}) - \hbar \omega_q \\ \vec{k}' &= \vec{k} - \vec{q} \end{aligned} \right\} \quad (4.33)$$

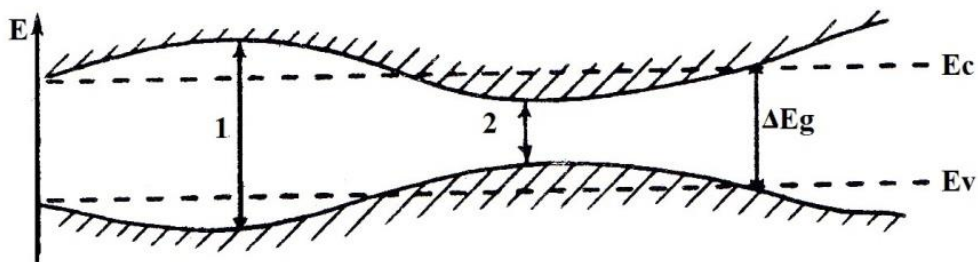
თუ იმპულსის შენახვის კანონი ფონონებზე ელექტრონების გაბნევისას ემორჩილება (4.32) ან (4.33) გამოსახულებას, ასეთ გაბნევას ნორმალურს, ანუ N პროცესს უწოდებენ. ამ დროს ენერგიის გადაცემის მიმართულება არ იცვლება – ელექტრონი იმავე ზონაში რჩება.

არსებობს გაბნევის ისეთი პროცესებიც, რომლებისთვისაც იმპულსის შენახვის კანონი სრულდება შებრუნებული მესრის რაღაც \vec{b} ვექტორამდე სიზუსტით.

$$\vec{k}' \pm \vec{k} = \vec{q} + 2\pi\vec{b}. \quad (4.34)$$

ასეთ პროცესს გადასროლის, ანუ U პროცესს უწოდებენ. ამ დროს იცვლება ენერგიის გადაცემის მიმართულება და გაბნევის შედეგად ელექტრონი აღმოჩნდება სხვა ქვეზონაში.

ელექტრონების გრძელტალღოვან აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევის შესასწავლად გამოიყენება ბარდინისა და შოკლის მიერ დამუშავებული დეფორმაციული პოტენციალის მეთოდი. მყარი სხეულების ზონური თეორიის ძლიერი ბმის მიახლოებიდან გამომდინარეობს, რომ დაშვებული ზონების ენერგეტიკული მდებარეობა და ზონების სიგანე დამოკიდებულია მეზობელ ატომებს შორის მანძილზე. თუ მესრის შემადგენელი ატომების სითბური რხევების შედეგად მესრის მუდმივა იცვლება, მაშინ ეს გარკვეულ ზეგავლენას მოახდენს კრისტალის ზონურ სტრუქტურაზე. განივი ტალღები მყარ სხეულში იწვევს ძვრის დეფორმაციას და არ ცვლის კრისტალის მოცულობას. ატომებს შორის მანძილი შეიცვლება მხოლოდ გრძივი ტალღების შემთხვევაში, რომელიც კუმშავს და ჭიმავს კრისტალს და ამდენად, განაპირობებს გამტარობისა და სავალენტო ზონების ექსტრემალურ მნიშვნელობათა პერიოდულ ცვლილებას (ნახ. 4.10). სწორედ ამ ცვლილებაზე ხდება ელექტრონების გაბნევა.



ნახ. 4.10. გრძივი აკუსტიკური რხევების ზემოქმედებით კრისტალის ენერგეტიკული ზონების ექსტრემალური მნიშვნელობების ცვლილების სქემა (1-მესრის მუდმივა შემცირდა, 2-გაიზარდა)

ბარდინ-შოკლის მოდელის შესაბამისად აკრძალული ზონის სიგანის ცვლილება კრისტალის \vec{r} წერტილსა და დროის t მომენტში დეფორმაციული პოტენციალით განისაზღვრება

$$\Delta E'_g - \Delta E_g = V(\vec{r}, t), \quad (4.35)$$

რომელიც თავის მხრივ, შეგვიძლია ჩავწეროთ გამტარობისა და სავალენტო ზონების დეფორმაციული პოტენციალების საშუალებით

$$V(\vec{r}, t) = V_c(\vec{r}, t) - V_v(\vec{r}, t), \quad (4.36)$$

ხოლო თითოეული ზონის დეფორმაციული პოტენციალი U დეფორმაციის სიდიდითა და მოცემული ზონის დეფორმაციული პოტენციალის მუდმივებით განისაზღვრება

$$\left. \begin{aligned} V_c(\vec{r}, t) &= \sum_{ij} \Xi_{ij}^c U_{ij}(\vec{r}, t) \\ V_v(\vec{r}, t) &= \sum_{ij} \Xi_{ij}^v U_{ij}(\vec{r}, t) \end{aligned} \right\} \quad (4.37)$$

დეფორმაციული პოტენციალის მუდმივა Ξ ერთეულოვანი დეფორმაციისას მოცემული ზონის ენერჯის ცვლილების სიდიდეს გამოხატავს.

გრძივ აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევის პროცესის მახასიათებელი რელაქსაციის დრო შეიძლება ასე წარმოვიდგინოთ

$$\tau = \tau_0 T^{-\frac{3}{2}} \varepsilon^{-\frac{1}{2}}, \quad (4.38)$$

სადაც

$$\tau_0 = \frac{\pi^2 \hbar^4 C}{2(2m_n^*)^{\frac{3}{2}} \Xi^2 \varepsilon^2 N}, \quad (4.39)$$

N ატომების კონცენტრაციაა.

ისეთ ნახევრად გამტარებში, რომლებშიც ქიმიური ბმა ნაწილობრივ იონურ ხასიათს ატარებს ($A^{III}B^V$ – ტიპის ნახევრად გამტარები) გაბნევის ძირითად მექანიზმს წარმოადგენს ოპტიკურ ფონონებზე გაბნევა. ამ შემთხვევაში დეფორმაციული პოტენციალის მოდელის ნაცვლად გამოიყენება პოლარიზაციული პოტენციალის მოდელი. როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, ოპტიკური რხევებისას სხვადასხვა ნიშნის იონები სხვადასხვა ფაზაში ირხევიან, რის გამოც მესერი პოლარიზებულია, ჩნდება გარკვეული დაძაბულობის მიკრო ელექტრული ველი და სწორედ ამ მიკროველზე ხდება ელექტრონების გაბნევა.

მაღალი ტემპერატურების შემთხვევაში, გაბნევა დრეკადია და რელაქსაციის დრო გამოითვლება შემდეგი ფორმულით

$$\tau = \tau'_0 T^{-\frac{1}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}, \quad (4.40)$$

თუ ტემპერატურა მცირეა, გაბნევა არადრეკადია და შესაბამისად გვექნება

$$\tau = \tau''_0 \exp \frac{\hbar \omega(\vec{q})}{k_0 T}, \quad (4.41)$$

სადაც

$$\tau'_0 = \tau''_0 - \frac{Ma^4}{m_n^* \frac{1}{2} Z^2} \quad (4.42)$$

გაბნევის ალბათობა გრძივ ოპტიკურ ფონონებზე მეტია ვიდრე განივზე.

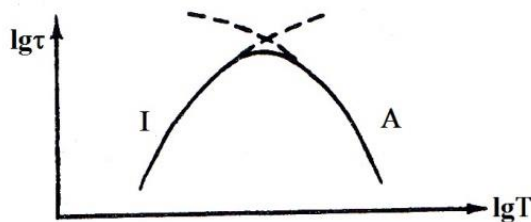
4.5. მუხტის გადამტანების შერეული გაბნევა

როგორც ზემოთ იყო ნაჩვენები, ნახევრად გამტარებში არსებობს მუხტის გადამტანების გაბნევის ოთხი ძირითადი მექანიზმი: ესენია – გაბნევა ნეიტრალურ მინარევებზე (N), იონიზირებულ მინარევებზე (I). აკუსტიკურ ფონონებზე (A) და ოპტიკურ ფონონებზე (O). ამ ოთხი ძირითადი მექანიზმიდანაც სხვადასხვა კრისტალში და სხვადასხვა პირობებში შეიძლება გამოიყოს შედარებით უფრო პრიორიტეტული მექანიზმი. მაგალითად Si -ში და Ge -ში და საერთოდ კოვალენტურ კრისტალებში ძირითადად ადგილი აქვს I და A გაბნევას. იონურ ნახევრად გამტარებში გვხვდება I და O გაბნევა. წინა პარაგრაფში განხილული რელაქსაციის დროის გამოსახულებებიდან გამომდინარე I, A ან I, O შერეული გაბნევისათვის შეგვიძლია ჩავწეროთ შემდეგი თანაფარდობანი:

$$\tau_{I,A} = \tau_{0A} \varepsilon^2 \left(\varepsilon^2 + \frac{\tau_{0A}^2}{\tau_{0I}^2} \right)^{-1}, \quad (4.43)$$

$$\tau_{I,O} = \tau_{0O} \varepsilon^2 \left(\varepsilon^2 + \frac{\tau_{0O}^2}{\tau_{0I}^2} \right)^{-1}. \quad (4.44)$$

აღსანიშნავია, რომ ორი ტიპის მექანიზმის მოქმედებისას ტემპერატურათა სხვადასხვა უბანში ერთ-ერთი მექანიზმის წვლილი გადამწყვეტია. მაგალითად: კოვალენტური კრისტალებისათვის დაბალ ტემპერატურაზე რელაქსაციის დროს განსაზღვრავს დაიონებული მინარევებზე გაბნევა, ხოლო მაღალ ტემპერატურაზე – აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევა (ნახ. 4.11). თუმცა, ცხადია, რომ ამა თუ იმ ტემპერატურაზე გაბნევის კონკრეტული მექანიზმის გამოვლინება კრისტალის პარამეტრებზეც არის დამოკიდებული.



ნახ. 4.11. რელაქსაციის დროის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება გაბნევის სხვადასხვა მექანიზმისათვის კოვალენტურ ნახევრად გამტარებში

რელაქსაციის დროის ენერგიასა და ტემპერატურაზე დამოკიდებულებების თავისებურებების გამოსავლინებლად გაბნევის სხვადასხვა მექანიზმის მოქმედებისას, მოსახერხებელია ზემოთ განხილული ძირითადი თანაფარდობის ერთ გამოსახულებაში გაერთიანება

$$\tau(T, \varepsilon) = \tau_0 T^S \varepsilon^{r-\frac{1}{2}} \quad (4.45)$$

s -ისა და r -ის მნიშვნელობები თავმოყრილია ცხრილში 4.1

ცხრილი 4.1

ტემპერატურისა და უგანზომილებო ენერჯიის ხარისხის მაჩვენებელთა მნიშვნელობები გაბნევის სხვადასხვა მექანიზმისათვის

	N	I	A	$O(T > \theta)$	$O(T < \theta)$
s		$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$T^S - e^{\frac{\hbar\omega(\vec{q})}{k_0T}}$
r	$-\frac{1}{2}$		0	1	$\frac{1}{2}$

r -ს გაბნევის ფაქტორს უწოდებენ.

კინეტიკური მოვლენები ნახევრად გამტარებში

5.1. ელექტრო გამტარობა. ძვრადობა.

ნახევრად გამტარების ფიზიკის ერთ-ერთ საკვანძო საკითხს წარმოადგენს მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე გარეშე ველების (ელექტრული, მაგნიტური, სითბური) ზემოქმედების შესწავლა. ველის გავლენით მუხტის გადამტანების სისტემა გამოდის თერმოდინამიკური წონასწორობის მდგომარეობიდან (4.1) და ებმება რა მიმართულ მოძრაობაში, განაპირობებს სხვადასხვა სახის ეფექტს, რომლებსაც კინეტიკურ მოვლენებს უწოდებენ. ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების (4.1) ამოხსნა საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ ამა თუ იმ კინეტიკური პროცესის აღწერისათვის აუცილებელი კინეტიკური კოეფიციენტები. ასე მაგალითად, (2.1), კუთრი ელექტროგამტარობა σ განსაზღვრავს ელექტრული ველით კრისტალში აღძრულ დენის სიდიდეს

$$\vec{J} = \sigma \vec{\xi} = en\vec{V}_d = en\mu\vec{\xi} = \frac{e^2 \langle \tau \rangle n}{m^*} \vec{\xi}. \quad (5.1)$$

მუხტის გადამტანების ძვრადობა (საშუალო დრეიფული სიჩქარე ერთეულ-ვან ელექტრულ ვალში)

$$\mu = \frac{|\vec{V}_d|}{|\vec{\xi}|} = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (5.2)$$

დამოკიდებულია გაბნევის მექანიზმზე (τ – რელაქსაციის დროის დამოკიდებულების გათვალისწინებით, 4.5) და ისევე, როგორც კონცენტრაცია, განისაზღვრება არა-წონასწორული განაწილების ფუნქციით $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$.

ცხადია, ძვრადობაც და ელექტროგამტარობაც ზონურ პარამეტრებს წარმოადგენს. თუ გავითვალისწინებთ, რომ, მაგალითად, გამტარობის ზონა ზოგადად შეიძლება შედგებოდეს M ექვივალენტური მინიმუმისგან და ეფექტური მასაც შეიძლება ანიზოტროპული იყოს (2.1; 2.2), მაშინ ელექტროგამტარობა ტენზორული სიდიდე იქნება და:

$$\vec{J} = \sum_{z=1}^M \vec{J}_z. \quad (5.3)$$

$$n = \sum_{z=1}^M n_z. \quad (5.4)$$

$$\{\sigma_{ij}\} = \sum_{z=1}^M \{\sigma_{ij}\}_z. \quad (5.5)$$

სადაც

$$\{\sigma_{ij}\}_z = \frac{e^2 n_z \langle \tau_z \rangle}{\{m_{ij}^*\}_z} \quad (5.6)$$

$\{m_{ij}^*\}_z$ – ეფექტური მასის ტენზორის კომპონენტებია z მიმართულებაში.

ანალოგიურად განიხილება სავალენტო ზონის პარამეტრებიც.

ძვრადობის ტემპერატურული დამოკიდებულება იმეორებს $\tau(T)$ დამოკიდებულების სახეს (4.5). ძალიან დაბალი ტემპერატურების არეში, როდესაც, ძირითადად, გაბნევა მიმდინარეობს ნეიტრალურ მინარევებზე, ძვრადობა არ არის დამოკიდებული ტემპერატურაზე.

$$\mu = \mu_{0N} T^0 \quad \text{და} \quad \mu_{0N} = \frac{e^3 m^*}{20 \epsilon \hbar^3 N_0} \quad (5.7)$$

ტემპერატურის მომატებისას გაბნევის ძირითად მექანიზმად გვევლინება გაბნევა იონიზირებულ მინარევებზე

$$\mu = \mu_{0I} T^{3/2} \quad \text{და} \quad \mu_{0I} \sim m^{*-1/2} \quad (5.8)$$

მაღალ ტემპერატურაზე მუხტის გადამტანების გაბნევა ხდება მესრის სითბურ რხევებზე. აკუსტიკურ ფონებზე გაბნევისას

$$\mu = \mu_{0A} T^{-3/2} \quad \text{და} \quad \mu_{0A} \sim m^{*-5/2} \quad (5.9)$$

სოლო ოპტიკურზე

$$\mu = \mu_{00} \left(e^{\frac{\hbar \omega(q)}{k_0 T}} - 1 \right) \quad \text{და} \quad \mu_{00} \sim m^{*-3/2} \quad (1.10)$$

მუხტის გადამტანების კონცენტრაციისა და ძვრადობის (ნახ. 5.1) ტემპერატურული დამოკიდებულებები განაპირობებენ ელექტროგამტარობის დამოკიდებულებას ტემპერატურაზე

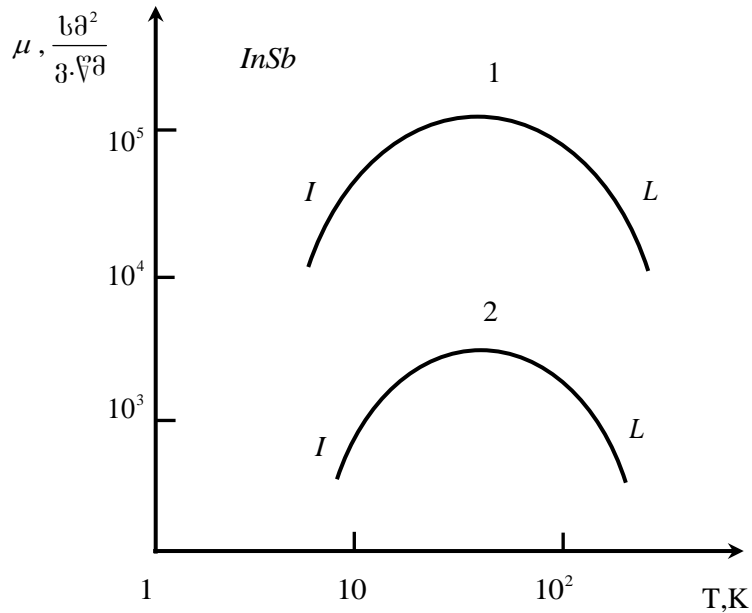
$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = en\mu_n + ep\mu_p \quad (5.11)$$

მაგალითად, საკუთარი ნახევრად გამტარისათვის (იონიზირებულ მინარევებზე ან აკუსტიკურ ფონებზე გაბნევისას) გვექნება

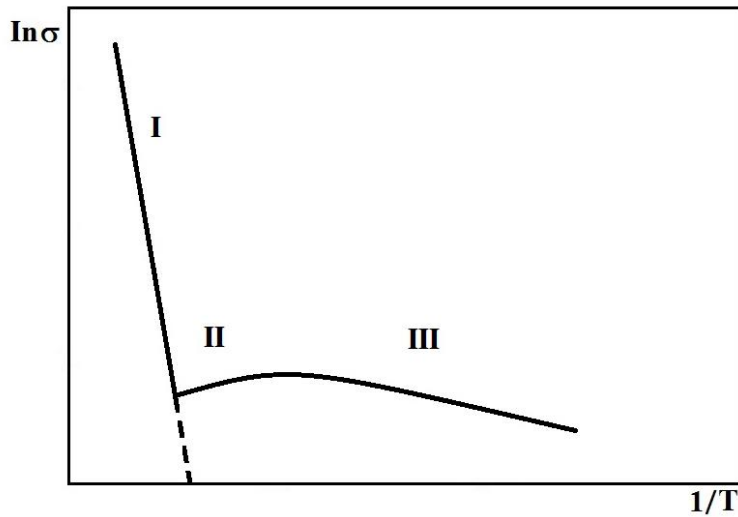
$$\sigma = \sigma_{0T} T^{\pm 3/2} e^{-\frac{\Delta E_g}{2k_0 T}} \quad (5.12)$$

ვინაიდან, უმეტესად, ექსპონენციალური წევრის გავლენა გადამწყვეტია, შესაძლებელია (5.12)-ის უფრო მარტივი სახით წარმოდგენა საკუთარი და მინარეული

$$\sigma = \sigma_{01} \cdot e^{-\frac{\Delta E_g}{2k_0 T}} \quad (5.13)$$



ნახ. 5.1. მუხტის გადამტანების ძვრადობის ტემპერატურაზე დამოკიდებულება გაბნევის სხვადასხვა მექანიზმისას (*I* – იონიზირებულ მინარევებზე, *L* – მესრის სიბურ რხეებზე. $n \sim 10^{14} \text{ სმ}^{-3}$, $p \sim 10^{16} \text{ სმ}^{-3}$)



ნახ. 5.2. ელექტროგამტარობის ტემპერატურული დამოკიდებულება (I-საკუთარი გამტარობის, II-მინარევის გამოფიტვის, III-მინარეული გამტარობის ტემპერატურული არეები).

$$\sigma = \sigma_{03} \cdot e^{-\frac{\Delta E_1}{2k_0T}} \quad (5.14)$$

გამტარობის ტემპერატურული არეებისათვის, ხოლო მინარევის გამოფიტვის არეში $\sigma(T)$ დამოკიდებულებას ფაქტიურად გაბნევის მექანიზმი განსაზღვრავს (ნახ. 5.2.)

$$\sigma = \sigma_{02} \cdot e^{\pm \frac{3}{2}} \quad (5.15)$$

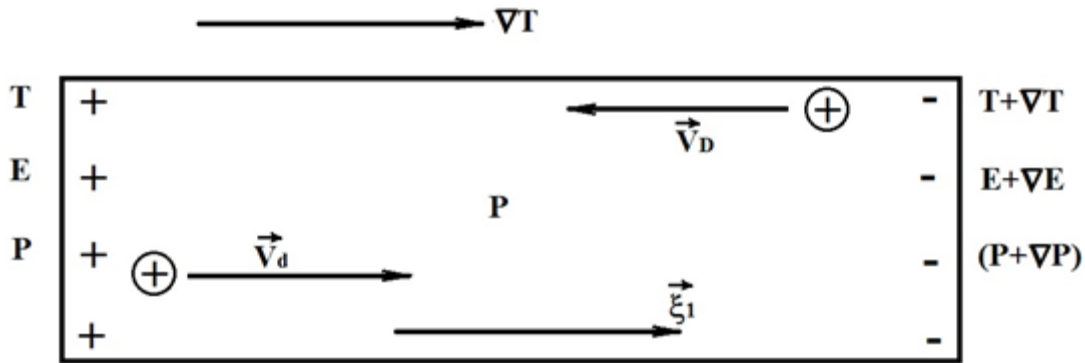
5.2. თერმოელექტრული მოვლენები

კრისტალში ტემპერატურული გრადიენტის და ელექტრული ველის ურთიერთშემოქმედების თუ ურთიერთაღძვრის შესაძლებლობა განაპირობებს მოვლენათა კლასს, რომლებიც თერმოელექტრული მოვლენების სახელწოდებას ატარებს. ცნობილია სამი ასეთი ეფექტი – ზეებეკის, პელტიეს და ტომსონის. თერმოელექტრული პროცესების აღძვრა შესაძლებელია როგორც ერთგვაროვანი, ასევე არაერთგვაროვანი კრისტალების მოცულობაში ანკრისტალების კონტაქტზე.

განვიხილოთ კრისტალის მოცულობაში მიმდინარე პროცესები. მაგალითისათვის ავიღოთ ხვრელური ნახევრად გამტარი, რომელშიც P კონცენტრაციის ხვრელები თანაბრად არის განაწილებული და აღძრულია ∇T ტემპერატურული გრადიენტი. ცხადია, მუხტის გადამტანების საშუალო ენერგია ცხელ ბოლოზე მეტი იქნება ცივ ბოლოზე მათ ენერგიასთან შედარებით. თუ განსხვავება ტემპერატურაში მნიშვნელოვანია, სითბურ ენერგიაში შესაბამისმა ნაზრდმა შეიძლება გამოიწვიოს ცხელ ბოლოზე კონცენტრაციის ნაზრდიც. მუხტის გადამტანების ერთგვაროვანი განაწილებისაკენ მისწრაფება განაპირობებს ცხელი ბოლოდან უფრო მოძრავი, უფრო დიდი ენერგიის მქონე (და, შეიძლება, უფრო მრავალრიცხოვანი) ხვრელების დიფუზიას ცივი ბოლოსაკენ, ვინაიდან ხვრელების მიერ დადებითი მუხტის გადატანას თან არ სდევს მაკომპენსირებული უარყოფითი (იონების) მუხტის მოძრაობა, ელექტრონეიტრალობის პირობა დაირღვევა – ცივ ბოლოზე ადგილი ექნება ჭარბი დადებითი მუხტის დაგროვებას, ხოლო ცხელ ბოლოზე დარჩება გაუკომპენსირებელი უარყოფითი მუხტი. ამრიგად, კრისტალში გაჩნდება შიგა ელექტრული ველი ξ_i (ნახ. 5.3.), რომელიც, თავის მხრივ, განაპირობებს ხვრელების დრეიფულ ნაკადს ჭარბი დადებითი მუხტის არიდან ჭარბი უარყოფითი მუხტის არისაკენ. ეს, დიფუზური ნაკადის საპირისპიროდ მიმართული, დრეიფული ნაკადი ძლიერდება ξ_i ველის ზრდასთან ერთად, რომელსაც მუხტების მიმდინარე განცალკევება განაპირობებს. მაგრამ, ბოლცმანის კინეტიკური განტოლების შესაბამისად $\left(\left(\frac{df}{dt}\right)_i = -\left(\frac{dr}{dt}\right)_v\right)$, კრისტალში სწრაფად დამყარდება დინამიური წონასწორობა – ξ_i ველი მიაღწევს ისეთ მნიშვნელობას, როდესაც მის მიერ აღძრული ხვრელების დრეიფული ნაკადი სრულად გააკომპენსირებს (კრისტალის ნებისმიერ წერტილში) ტემპერატურული გრადიენტით განპირობებულ დიფუზურ ნაკადს. მოცემული ტემპერატურული გრადიენტისას კრისტალის მოცუ-

ლობაში არსებულ, სტაციონარული პირობების უზრუნველყოფელ შიგა ელექტრულ ველს თერმოელექტრულს უწოდებენ.

ანალოგიურად წარიმართება პროცესები n -ტიპის ნახევრად გამტარში ელექტრონული ნაკადების აღძვრისას. ორივე შემთხვევაში კრისტალის ცივ ბოლოზე დაგროვილი მუხტის ნიშანი ძირითადი გადამტანების ნიშანს შეესაბამება, ხოლო ცხელზე – არაძირითადის.



ნახ. 5.3. მოცულობითი თერმო ემ ძალის აღძვრა (\vec{V}_D, \vec{V}_d – შესაბამისად დიფუზური და დრეიფული ნაკადების სიჩქარეებია)

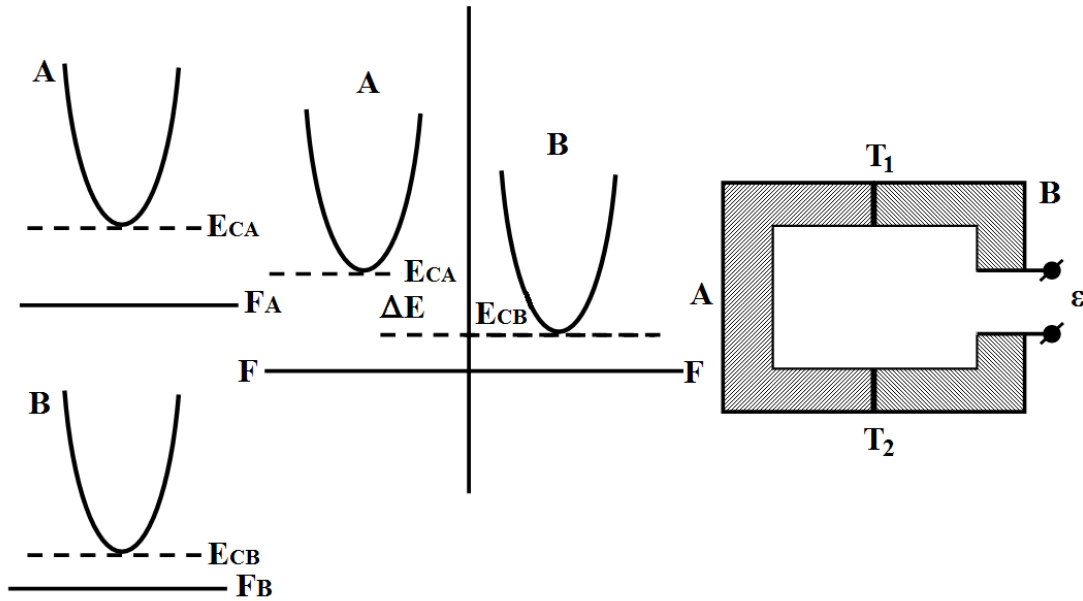
შერეული გამტარობის შემთხვევაში, როგორც დიფუზურ ასევე დრეიფულ ნაკადებში ორივე ნიშნის მუხტის გადამტანებს შეუძლიათ ჩაბმა, რის გამოც მოვლენა სუსტად იქნება გამოხატული. ელექტრონების და ხვრელების კონცენტრაციათა ტოლობის შემთხვევაში, თერმოელექტრული ველის არსებობა შესაძლებელია მხოლოდ ძვრადობათა ($\mu_n > \mu_p$) განსხვავების წყალობით.

კრისტალების (თუ არაერთგვაროვან უბანთა) კონტაქტზე მიმდინარე პროცესებსაც საფუძვლად უდევს მუხტის გადამტანების დიფუზია შედარებით მაღალი კონცენტრაციის არიდან. თუ, მაგალითად, განვიხილავთ განსხვავებულ ფერმის ენერგიათა მქონე A და B n -ტიპის ნახევრად გამტართა კონტაქტს (ნახ. 5.4.), მაშინ ელექტრონების გადანაწილება ფერმის დონეთა გათანაბრებამდე განაპირობებს კონტაქტის მახლობელ ფენაში ლოკალური ელექტრული ველის და ნახევრად გამტარი ხელსაწყოების ფიზიკისათვის ერთ-ერთი უმნიშვნელოვანესი სიდიდის – კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობის აღძვრას

$$U = \frac{\Delta E}{e} = \frac{F_1 - F_2}{e} \quad (5.16)$$

კონტაქტური პროცესებით განპირობებული თერმო ემ ძალის გამოვლინება იქნება შესაძლებელი თუ A და B კრისტალის კონტაქტებს განსხვავებული ტემპერატურა ექნებათ. ამ პირობის დაცვა აუცილებელია, რათა ორივე კონტაქტზე აღძრულმა

(ტოლმა და საპირისპირო ნიშნის) კონტაქტურმა ძაბვებმა არ გააკომპენსირონ ერთმანეთი. თუ $T_1 \neq T_2$, მაშინ ფერმის დონეთა ტემპერატურაზე დამოკიდებულება უზრუნველყოფს განსხვავებული კონტაქტური ძაბვების არსებობას.



ნახ. 5.4. კონტაქტური თერმო ემ ძალის აღძვრის შესაძლებლობა

5.3. ზეებეკის ეფექტი

ზემთ განხილული მოცულობითი თუ კონტაქტური ბუნების ელექტრული ველის აღძვრა, გაწყვეტილ წრედში გვაძლევს თერმო ემ ძალას, რომლის სიდიდე სისტემაში ტემპერატურის ნაზრდზე არის დამოკიდებული და სტაციონარულ პირობებში

$$d\xi_Z = S_{AB}dT \quad (5.17)$$

S_{AB} კონტაქტში მყოფი კრისტალების ან კრისტალის და ლითონური გამომყვანი სადენის მახასიათებელ ზეებეკის კოეფიციენტს (ფარდობით დიფერენციალურ თერმო ემ ძალას) წარმოადგენს. ვინაიდან თვით ზეებეკის კოეფიციენტმაც შეიძლება გამოავლინოს ტემპერატურაზე დამოკიდებულება (ზოგიერთ შემთხვევაში მნიშვნელოვანიც), ამიტომ, ზოგადად ტემპერატურათა გარკვეული $T_2 - T_1$ ინტერვალისათვის

$$\xi_Z = \int_{T_1}^{T_2} S_{AB}(T)d(T). \quad (5.18)$$

თუ განიხილება ნახევრად გამტარისა და ლითონისაგან შემდგარი წრედი, მაშინ, უმეტეს შემთხვევაში, ეფექტში ლითონის წველილი, სიმცირის გამო შეიძლება უგულებელვყოთ (ვინაიდან, ლითონში ელექტრონების კონცენტრაცია და ენერგია თითქმის არ არის დამოკიდებული ტემპერატურაზე) და ჩავთვალოთ, რომ თერმო ემ ძალა მთლიანად განისაზღვრება მოცემული ნახევრად გამტარის S აბსოლუტური დიფერენციალური თერმო ემ ძალით.

თეორია გვაძლევს გამოსახულებას ზეებეკის კოეფიციენტისათვის, ეყრდნობა რა იმ მოსაზრებას, რომ თერმო ემ ძალის ადპერის მექანიზმი (დიფუზია მოცულობაში და არაერთგავროვნებათა კონტაქტზე) შეიძლება მარტივად გათვალისწინებულ იყოს ფერმის ენერგიის გრადიენტის და კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობის ტემპერატურულ გრადიენტზე დამოკიდებულების განხილვით.

$$S = -\frac{eU_k - \Delta F}{\nabla T} \quad (5.19)$$

და გადაუგვარებელ ნახევრად გამტარისათვის მიიღება პისარენკოს ფორმულა

$$S = \frac{k_0}{e} \left(\frac{5}{2} + r - \eta \right), \quad (5.20)$$

ხოლო მარტივი, პარაბოლური ზონების მქონე გადაგვარებული ნახევრად გამტარისათვის მოტის გამოსახულება

$$S = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} (r+1) \frac{k_0 T}{F}. \quad (5.21)$$

(როგორც III თავში იყო ნაჩვენები $\eta = -\ln \frac{\rho_c^*}{n}$ და $\eta = -\ln \frac{\rho_v^*}{p}$ შესაბამისად n და p ტიპის ნახევრად გამტარებისათვის).

მაშასადამე, მინარეულ ნახევრად გამტარში მუხტის გადამტანების ნიშანი განსაზღვრავს S -ის ნიშანს. თუ მუხტის არაძირითადი გადამტანების კონცენტრაცია არ არის მცირე და ე.ი. საქმე გვაქვს შერეულ გამტარობასთან, მაშინ, პროცესი რთულდება და აღნიშნული კორექცია შეიძლება აღარ შესრულდეს. ამ შემთხვევაში მუხტის გადამტანების კონცენტრაციათა თანაფარდობასთან ერთად გასათვალისწინებელია ძვრადობათა განსხვავების გავლენაც

$$S = \frac{k_0}{e} (n\mu_n + p\mu_p)^{-1} \left[p\mu_p \left(r_p + \frac{5}{2} + \eta + \varepsilon_g \right) - n\mu_n \left(r_n + \frac{5}{2} - \eta \right) \right]. \quad (5.22)$$

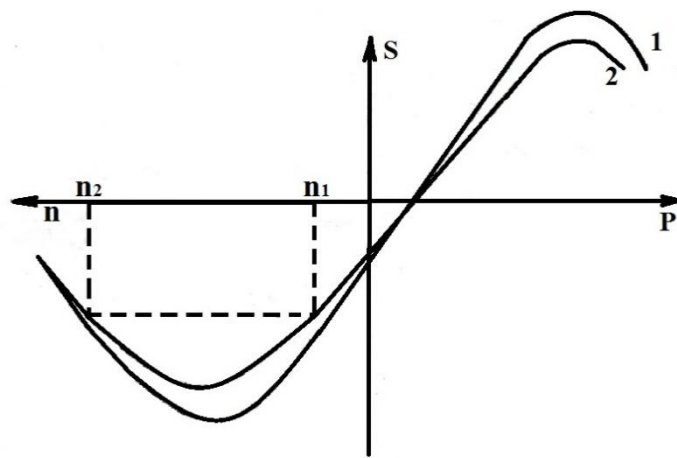
თუ შევადარებთ (5.20)-(5.22) დავინახავთ, რომ შერეული გამტარობა ამცირებს თერმო ემ ძალას. მართლაც, დიფუზურ პროცესში ელექტრონების და ხვრელების ერთდროული ჩაბმა შეასუსტებს მუხტების განცალკევებას ურთიერთკომპენსაციის შედეგად.

აღსანიშნავია, რომ საკუთარ ნახევრად გამტარში ($\eta = -0,5\varepsilon_g$) თერმო ემ ძალის შესწავლა საშუალებას გვაძლევს შევაფასოთ აკრძალული ზონის სიგანე

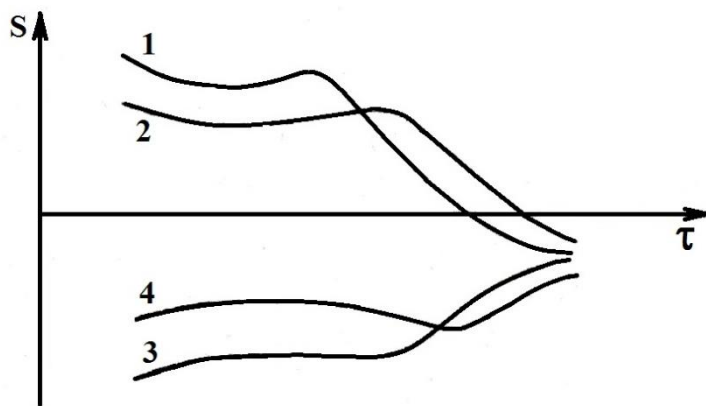
$$S = \frac{k_0}{e} \frac{1-b}{1+b} \left(r + \frac{5}{2} + \frac{\Delta E_g}{2k_0T} \right) \quad (1.23)$$

აქ $b = \frac{\mu_n}{\mu_p}$.

თერმო ემ ძალისათვის დამახასიათებელი კონცენტრაციული და ტემპერატურული დამოკიდებულებები მოყვანილია 5.5. ნახაზზე და 5.6. ნახაზზე (გადაუგვარებული ნახევრად გამტარისათვის).



ნახ. 5.5. თერმო ემ ძალის დამოკიდებულება მუხტის გადამტანების კონცენტრაციაზე აკრძალული ზონის ორი სხვადასხვა სიგანისათვის $\Delta E_{g1} > \Delta E_{g2}$.



ნახ. 5.6. თერმო ემ ძალის ტემპერატურული დამოკიდებულებები სხვადასხვა ხარისხით ლეგირებულ - 1,2 აქცეპტორულ ($N_2 > N_1$) და 3,4 დონორულ ($N_4 > N_3$) ნახევრად გამტარებში

წარმოდგენილი გრაფიკების მიხედვით შეიძლება აღვნიშნოთ შემდეგი:

1. შერეული გამტარობისას, როდესაც ხერხელების კონცენტრაცია მნიშვნელოვნად არ აღემატება ელექტრონების კონცენტრაციას, ზეებეკის კოეფიციენტის ნიშანი შეიძლება არ შეესაბამებოდეს მუხტის ძირითადი გადამტანების ნიშანს;
2. დიფერენციალური თერმო ემ ძალის ერთი და იგივე მნიშვნელობა შესაძლებელია გამოვლინდეს მუხტის გადამტანების მნიშვნელოვნად განხვავებული კონცენტრაციისას (n_1, n_2 ნახ.5.5-ზე).
3. აკრძალული ზონის სიგანის შემცირება და ლეგირების ხარისხის ზრდა ამცირებს თერმო ემ ძალას.
4. თერმო ემ ძალის მაქსიმუმი ვლინდება მინარევის გამოფიტვის შესაბამის ტემპერატურულ ინტერვალში. ტემპერატურის ზრდისას S მცირდება მუხტის თავისუფალი გადამტანების რიცხვის მატების შედეგად.

მინარეული ნახევრად გამტარის თერმო ემ ძალის ტემპერატურული და კონცენტრაციული დამოკიდებულებების შესწავლა საშუალებას გვაძლევს დავადგინოთ ფერმის დონის მდებარეობა (გაბნევის ცნობილი მექანიზმისას) და შევაფასოთ მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მასა, თუ განსაზღვრულია მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია (3.4).

დაბალი ტემპერატურისას მნიშვნელოვანი ხდება თერმო ემ ძალის აღძვრის კიდევ ერთი მექანიზმი – ელექტრონების ფონონებით წატაცება. მართლაც, კრისტალში ტემპერატურული გრადიენტის არსებობა, მუხტის გადამტანების ნაკადის გარდა, განაპირობებს ფონონების ნაკადსაც ცხელი ბოლოდან ცივისაკენ. ამიტომ, ელექტრონ-ფონონური ურთიერთქმედების შედეგად (ელექტრონის ფონონზე გაბნევა), ელექტრონისათვის ალბათური ხდება ფონონისაგან ისეთი იმპულსის შექმნა, რომელიც ტემპერატურული გრადიენტის საპირისპიროდ იქნება მიმართული. მუხტის გადამტანების ნაკადის ინტენსივობა მნიშვნელოვნად იზრდება. თერმო ემ ძალის ეს მექანიზმი აღიწერება პიკუსის ფორმულით

$$S_{eq} = \frac{1}{3} \frac{k_0}{e} \frac{m_n^* V_{\text{ბგ}}^2}{k_0 T} \frac{\tau_q}{\tau_e} \quad (1.24)$$

სადაც $V_{\text{ბგ}}$ ბგერის სიჩქარეა, τ_e და τ_q – რელაქსაციის დრო, შესაბამისად, ელექტრონებისა და ფონონებისათვის.

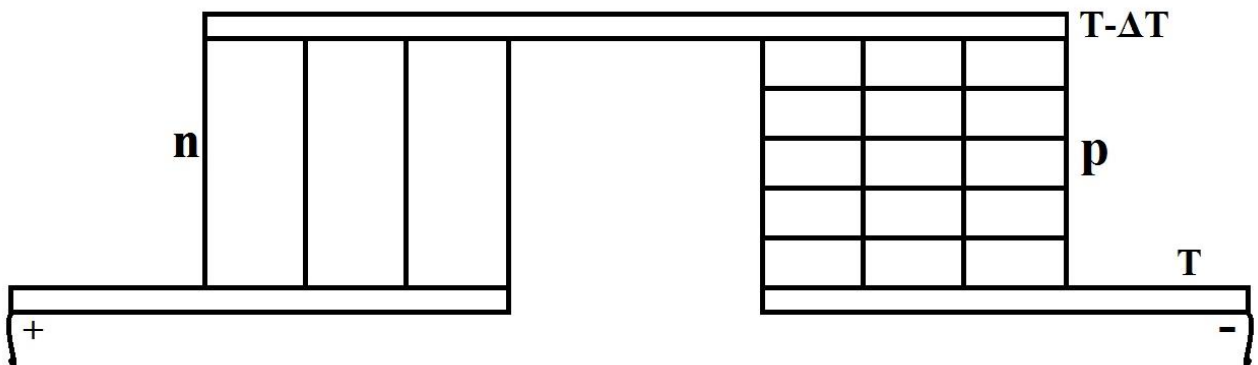
შედარებით მაღალ ტემპერატურაზე, ფონონ-ფონონური ინტენსიური გაბნევის შედეგად, ფონონების ნაკადი ბოლოსკენ მკვეთრად მცირდება და ამდენად, თერმო ემ ძალის განხილული მექანიზმიც აღარ ვლინდება.

5.4. პელტიეს და ტომსონის ეფექტები

ნახევრად გამტარში შიგა (თერმოელექტრული) ან კონტაქტური ველის არსებობა, ელექტრული დენის გატარებისას, განაპირობებს ჯოულის სითბოსთან ერთად დამატებითი სითბოს რაოდენობის გამოყოფას, ან შთანთქმას, რაც ტომსონის და პელტიეს ეფექტების არსს შეადგენს.

პელტიეს მოვლენა (ზეებეკის ეფექტის გარკვეულ წილად შებრუნებული ეფექტი) შეიძლება აიხსნას ორი კრისტალის (ან ორი არაერთგვაროვანი უბნის) კონტაქტზე ენერგეტიკული დიაგრამის განხილვით. როგორც 5.2-ში იყო ნაჩვენები, A და B კრისტალების ფერმის ენერგიათა განსხვავება განაპირობებს კონტაქტზე ΔE პოტენციური ბარიერის ჩამოყალიბებას (ნახ. 5.4). კონტაქტში გამავალი, გარეშე დენის წყაროთი აღძრული ელექტრული დენის მიმართულების მიხედვით, დრეიფში მონაწილე ელექტრონი ან გადალახავს ამ ბარიერს B კრისტალიდან A -ში მოძრაობისას, ან ვარდება პოტენციურ ΔE ორმოში. პირველ შემთხვევაში საჭირო ΔE ენერგიას ელექტრონი შეიძენს B ნახევრად გამტარის კრისტალური მესრისაგან და განაპირობებს მისი ტემპერატურის შემცირებას. მეორე შემთხვევაში, პირიქით გადასცემს მას ΔE ჭარბ ენერგიას და გამოიწვევს კონტაქტის მახლობელი ფენის გათბობას.

პელტიეს სითბოს არსებობა ასეთ ინტერპრეტაციასაც ექვემდებარება. კონტაქტური ძაბვის არსებობა ხელს უწყობს ან ეწინააღმდეგება კონტაქტში დენის გავლას, მისი მიმართულების მიხედვით. თუ კონტაქტური ველი ჩაბმულია დენის შექმნის პროცესში, მაშინ საჭირო ენერგია გაიცემა კრისტალური მესრის მიერ და კონტაქტის მახლობელი ფენა ცივდება. დენის საპირისპირო მიმართულებისას კონტაქტი თბება იმ ენერგიის ხარჯზე, რომელიც დენის წყარომ დამატებით გამოყო კონტაქტური ველის წინააღმდეგობის დასაძლევად.



ნახ. 5.7. პელტიეს მაცივრის სქემა. $\Delta T = 30 K$ ($U = 2$ ვ; $I = 20$ ა)

კრისტალში ფართობის ერთეულში გამოყოფილი ან შთანთქმული პელტიეს სითბოს რაოდენობა პროპორციულია კონტაქტში გასული მუხტის სიდიდისა და კონტაქტში მოყვანილ ნივთიერებათა გვარობაზე და მოკიდებული

$$Q_{\Pi} = \Pi_{AB}q = \Pi_{AB}It. \quad (5.25)$$

აქ Π_{AB} პელტიეს კოეფიციენტია.

მარტივად შეიძლება შეფასდეს კონტაქტის მახლობელი იმ ფენის სისქე, სადაც ხდება პელტიეს სითბოს გამოყოფა ან შთანთქმა. ეს სისქე რამოდენიმე ატომთაშორისო მანძილის რიგისა უნდა იყოს, ვინაიდან როგორც ეს IV თავში იყო ნახვენები, მუხტის გადამტანების მესრის დეფექტთან 1-3 დაჯახება საკმარისია თერმოდინამიკური წონასწორობის აღსადგენად.

ტომსონის ეფექტი მოცულობითი მოვლენაა და მისი ფიზიკური საფუძველი განხილული იყო 5.2 პარაგრაფში. ისევე, როგორც პელტიეს ეფექტისათვის, ორი ინტერპრეტაცია შეიძლება იყოს წარმოდგენილი კრისტალში დენის გავლისას დამატებითი ტომსონის სითბოს გამოყოფა – შთანთქმის ასახსნელად (ტემპერატურული გრადიენტის და ე.ი. შიდა ელექტრული ველის არსებობის პირობებში). 1) თუ დენის აღმძრავი გარეშე ელექტრული ველი მიმართულია არსებული შიდა ველის საპირისპიროდ, მაშინ დენის წყარომ დამატებითი მუშაობა უნდა შეასრულოს ამ ველის დასაძლევად და ეს დამატებითი ენერგია გამოიყოფა კრისტალში ტომსონის სითბოს სახით. თუ კრისტალის წრედში ჩართვისას აღნიშნული ველები თანამიმართული აღმოჩნდებიან, მაშინ შიდა ველიც ჩაებმება კრისტალში დენის აღმძრა-შენარჩუნებაში. საჭირო ენერგიას გაიღებს კრისტალური მესერი, რის გამოც კრისტალის ტემპერატურა შემცირდება. 2) თუ გარეშე ველი თავისი მიმართულების შესაბამისად ხელს უწყობს მუხტის გადამტანების განცალკევებას, მაშინ ამ ველის გავლენით ცხელი ბოლოდან კრისტალის ცივ ბოლომდე მიღწეული ეს დამატებითი მუხტის გადამტანები ჭარბ ენერგიას გადასცემენ კრისტალურ მესერს და განაპირობებენ ტემპერატურის მომატებას. გარეშე ველის საპირისპირო მიმართულების შემთხვევაში, პირიქით, ცივიდან ცხელ ბოლოს მიღწეული მუხტის გადამტანები სითბური წონასწორობისათვის აუცილებელი ენერგიის ნაკლებობას შეივსებენ მესრის ენერგიის ხარჯზე და ამით შეამცირებენ კრისტალის ტემპერატურას.

კრისტალის მოცულობის ერთეულში გამოყოფილი ან შთანთქმული ტომსონის სითბოს სიდიდე პროპორციულია კრისტალში გასული მუხტის სიდიდისა და მის ბოლოებზე არსებული ტემპერატურათა სხვაობისა

$$Q_{\tau} = It \int_{T_1}^{T_2} \tau(T) d(T). \quad (5.26)$$

(5.26)-ში გათვალისწინებულია τ ტომსონის კოეფიციენტის ტემპერატურაზე დამოკიდებულების გამოვლენის შესაძლებლობა.

ამრიგად, თერმოელექტრული მოვლენების დასახასიათებლად გამოიყენება სამი კინეტიკური კოეფიციენტი S , Π , τ , რომლებიც მარტივი თერმოდინამიკური თანაფარდობებით არიან დაკავშირებული ერთმანეთთან

$$\Pi = S T \quad (5.27)$$

და

$$\tau = -T \frac{dS}{dT} \quad (5.28)$$

ტომსონის და, განსაკუთრებით პელტიეს მოვლენებს საკმაოდ დიდი პრაქტიკული გამოყენება გააჩნიათ. 5.7. ნახაზზე მაგალითისათვის მოყვანილია პელტიეს მაცივრის გამარტივებული სამუშაო სქემა.

5.5. სითბოგამტარობა ნახევრად გამტარში

თუ კრისტალში არსებობს ტემპერატურული გრადიენტი, მაშინ მისი საპირისპირო მიმართულებით აღიძვრება ენერჯიის W ნაკადი

$$W = -\chi \nabla T \quad (5.29)$$

ამ პროცესს სითბოგამტარობას, ხოლო χ სითბოგამტარობის კოეფიციენტს უწოდებენ

$$\chi = \frac{W}{|\nabla T|} \quad (5.30)$$

χ გვიჩვენებს დროის ერთეულში, კრისტალის ერთეულოვან კვებში გასულ სითბურ ენერჯიას, კრისტალში ერთეულოვანი ტემპერატურული გრადიენტის არსებობისას.

მყარ სხეულებში სითბოგამტარობის რამოდენიმე მექანიზმი არსებობს – ელექტრონული (ხვრელური), ფონონური, ბიპოლარული (ერთდროულად ელექტრონებით და ხვრელებით), ექსიტონური, ფოტონური (გამოსხივებით)

$$\chi = \chi_e + \chi_q + \chi_{p,n} + \chi_{ex} + \chi_{hv} \quad (5.31)$$

გადამწვევტი წვლილი მოდის თავისუფალ გადამტანებზე (ძირითადი მექანიზმია ლითონებში) და მესრის სითბურ რხევებზე (ძირითადია დიელექტრიკებში).

მესრის შემადგენელი ატომები წონასწორული მდგომარეობის მახლობლად რხევისას ერთმანეთს უცვლიან ენერჯიას და თუ კრისტალში არ არის დაცული სითბური წონასწორობა, მაშინ, ცხადია, მეტი ენერჯია გადაეცემა უფრო ინტენსიურად მერხევი ატომიდან უფრო სუსტად მერხევი ატომს. კინეტიკური თეორია ამ

მექანიზმისათვის გვაძლევს შემდეგ გამოსახულებას (ფონონური აირის ცნებაზე დაყდნობით)

$$\chi_q = \frac{1}{3} CV_q^2 \chi_q \quad (5.32)$$

სადაც C არის კრისტალის სიბოტევადობა, V_q – ფონონების მოძრაობის სიჩქარე, τ_q - მათი რელაქსაციის დრო. მოძრაობისას ფონონებიც განიცდიან გაბნევას და ასეთი გაბნევის რამოდენიმე მექანიზმი შეიძლება აღინიშნოს, რელაქსაციის დროის (და, ამდენად, სითბოგამტარობის) განსხვავებული ტემპერატურული დამოკიდებულებით: 1) წერტილოვან დეფექტებზე და ფონონებზე ($\chi_q \sim T^{-1}$); 2) ელექტრონებზე და დისლოკაციებზე ($\chi_q \sim T^2$); 3) მარცვლების და კრისტალის საზღვრებზე ($\chi_q \sim T^3$). ძირითადად მაინც ვლინდება ფონონური სითბოგამტარობის ტემპერატურაზე უკუპროპორციული დამოკიდებულება.

ვიდემან-ფრანცის კანონის მიხედვით ელექტრონული სითბოგამტარობა განისაზღვრება კრისტალის ელექტროგამტარობით, ტემპერატურით და მუხტის გადამტანების გაბნევის მექანიზმით

$$\chi_e = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 (r+2) \sigma T. \quad (5.33)$$

$$\chi_e = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 \frac{\pi^2}{3} \sigma T. \quad (5.34)$$

(შესაბამისად გადაუგვარებელი და გადაგვარებული ნახევრად გამტარებისათვის).

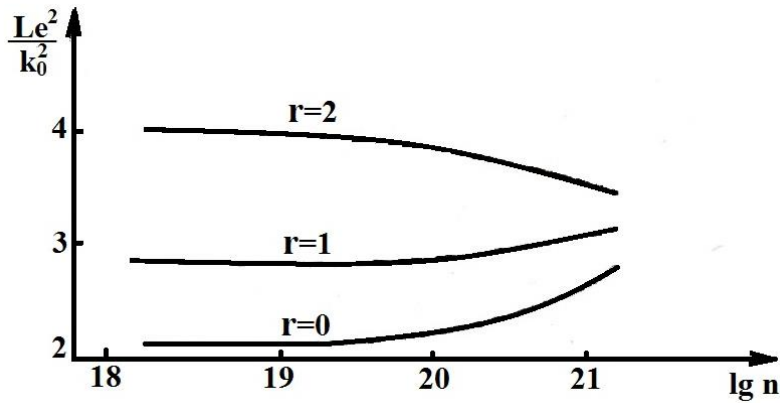
(5.33) და (5.34) შეიძლება ჩაიწეროს L ლორენცის რიცხვის გამოყენებით. L მუდმივაა გადაგვარებული ნახევრად გამტარისათვის, ხოლო გადაუგვარებელისათვის მხოლოდ გაბნევის r ფაქტორზეა დამოკიდებული

$$\frac{\chi_e}{\sigma} = LT \quad (5.35)$$

და

$$L = \begin{cases} \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 \frac{\pi^2}{3} \\ \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 (r+2) \end{cases}. \quad (5.36)$$

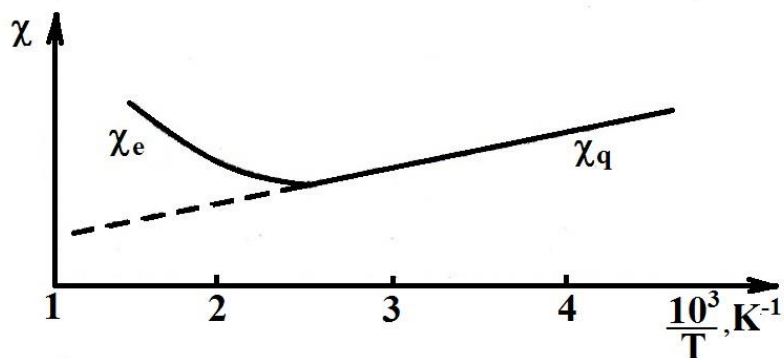
ნახევრად გამტარის გადაგვარების ხარისხს მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია განსაზღვრავს. კონცენტრაციათა გარკვეულ (გარდამავალ) ინტერვალში გამოვლინდება კონცენტრაციის გავლენაც ლორენცის რიცხვზე (ნახ. 5.8).



ნახ. 5.8. ლორენცის რიცხვის გაბნევის მექანიზმსა და მუხტის გადამტანების კონცენტრაციაზე დამოკიდებულება

ვიდემან-ფრანცის გამოსახულების შესაბამისად და ელექტროგამტარობის ტემპერატურული დამოკიდებულების გათვალისწინებით, ნახევრად გამტარის ძლიერი გადაგვარების შემთხვევაში, ელექტრონული სითბოგამტარობა ტემპერატურისაგან პრაქტიკულად დამოუკიდებელი იქნება, ხოლო გადაუგვარებელ ნახევრად გამტარში χ_e იზრდება ტემპერატურის მომატებისას. ნახ. 5.9-ზე ნაჩვენებია, რომ დაბალი ტემპერატურების არეში ვლინდება სითბოგამტარობის ფონონური მექანიზმისათვის დამახასიათებელი დამოკიდებულება ტემპერატურაზე, ხოლო შემდგომ პრიორიტეტული ხდება სითბოგამტარობის ელექტრონული მექანიზმი. თუ კრისტალში შერეულ გამტარობას აქვს ადგილი, სითბოგამტარობა მნიშვნელოვნად იზრდება, რაც მარტივ ფიზიკურ ინტერპრეტაციას ექვემდებარება.

$$L = \left(\frac{k_0}{e}\right)^2 (r+2) \left[(r+3) + \frac{\Delta E_g}{2k_0 T} \right]. \quad (5.37)$$



ნახ. 5.9. სითბოგამტარობის კოეფიციენტის დამოკიდებულება ტემპერატურაზე

მონოპოლარული გამტარობისას, სტაციონარულ პირობებში, როდესაც მუხტის ძირითადი გადამტანების დიფუზური ნაკადი გაწონასწორებულია მათი დრეიფული ნაკადით, სითბური ენერგიის გადატანა უზრუნველყოფილია დიფუზიაში ჩაბმული

მუხტის გადამტანების ენერჯის სიჭარბით დრეიფში მონაწილე გადამტანებთან შედარებით. ბიპოლარული გამტარობისას, დიფუზიაში ორივე ნიშნის მუხტის გადამტანების მონაწილეობა მნიშვნელოვნად ამცირებს მუხტის გადამტანების განცალკევებას. შიგა ელექტრული ველი და დრეიფული ნაკადი სუსტი იქნება, ხოლო საკუთარ ნახევრად გამტარში პრაქტიკულად ნულს გაუტოლდება. დიფუნდირებული ელექტრონებით და ხვრელებით მოტანილ სითბურ ენერჯიას დაემატება კრისტალის ცივ ბოლოზე მათი რეკომბინაციისას გამოყოფილი ის ენერჯია, რომელიც ცხელ ბოლოზე მათ გენერაციაზე დაიხარჯა.

სხვადასხვა სახის თერმოელექტრული მოწყობილობისათვის კონკრეტული ნახევრად გამტარული მასალის გამოყენების პერსპექტიულობა ფასდება Z პარამეტრით, რომელსაც თერმოელექტრულ ვარგისიანობას უწოდებენ

$$Z = \frac{S^2 \sigma}{\chi} \quad (5.38)$$

თუ გავითვალისწინებთ, რომ (5.38)-ში შემავალი სამივე კინეტიკური კოეფიციენტი ხასიათდება საკუთარი ტემპერატურული და კონცენტრაციული დამოკიდებულებით, ცხადი ხდება, რომ Z -ის შედარებით მაღალი მნიშვნელობის შენარჩუნება, ტემპერატურათა ფართო ინტერვალში. საკმაოდ რთულ ამოცანას წარმოადგენს ნახევრად გამტარული მასალათმცოდნეობისათვის.

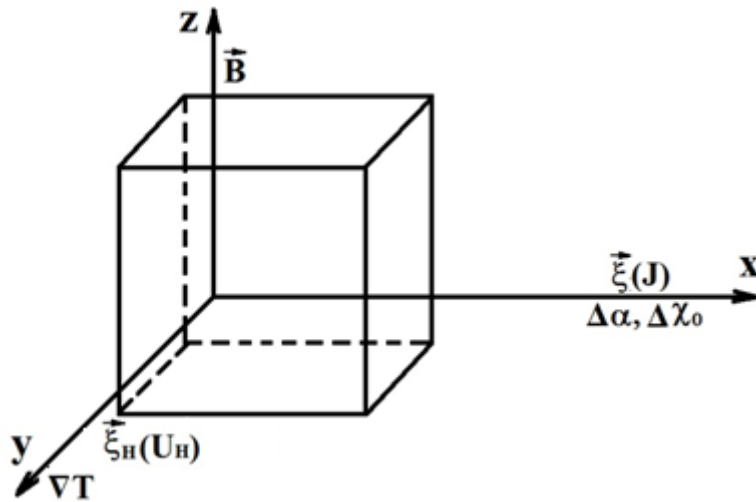
5.6. გალვანომაგნიტური მოვლენები

გალვანომაგნიტური ეფექტების სახელწოდებით აერთიანებენ კინეტიკურ მოვლენებს, რომელთა აღძვრა კრისტალზე მაგნიტური და ელექტრული ველების მოდებით არის გამოწვეული. საკმაოდ მრავალრიცხოვან გალვანომაგნიტურ მოვლენებს შორის უნდა გამოიყოს ოთხი კარგად შესწავლილი და მნიშვნელოვანი ეფექტი: პოლის, გაუსის, ეტინგსჰაუზენის, ნერნსტის.

5.10. ნახაზზე სქემატურად ნაჩვენებია ურთიერთმართობულ \vec{B} ინდუქციისა და $\vec{\xi}$ დაძაბულობის ველებში მოთავსებულ კრისტალში გალვანომაგნიტური პროცესების მახასიათებელი ფიზიკური სიდიდეები.

გალვანომაგნიტური ეფექტები შეიძლება დავეოთ ელექტრული ველის მიმართ განივ და გრძივ პროცესებად, ხოლო მაგნიტური ველის მიმართ ლუწ და კენტ მოვლენებად (ეფექტი კენტია, თუ \vec{B} ვექტორის მიმართულების საპირისპიროზე შეცვლისას, მოვლენის მახასიათებელი პარამეტრების ნიშანიც იცვლება).

ჰოლის და ეტინგსჰაუზენის ეფექტები კენტია და მდგომარეობს, შესაბამისად, დამატებითი განივი (ჰოლის) ელექტრული ველის და განივი ტემპერატურული გრადიენტის აღძვრაში. ლუწია გაუსის და ნერნსის ეფექტები, ანუ გრძივი მიმართულებით, შესაბამისად, ელექტროგამტარობის და სითბოგამტარობის ცვლილების მოვლენები.



ნახ. 5.10. გალვანომაგნიტური პროცესების სქემატური წარმოდგენა

კრისტალში კინეტიკური (და არა მარტო კინეტიკური) პროცესების მიმდინარეობა შეიძლება თვისობრივად განსხვავებული აღმოჩნდეს სხვადასხვა სიძლიერის მაგნიტურ ველში, რომლის სიძლიერე თავის მხრივ დამოკიდებულია კრისტალის გვარობასა და მის ფიზიკურ მდგომარეობაზე. ამიტომ მნიშვნელოვანია მაგნიტური ველის სიძლიერის ზუსტი კრიტერიუმის შერჩევა. მოცემული კრისტალისათვის მაგნიტური ველი ძლიერია, თუ მუხტის გადამტანის საშუალო თავისუფალი განარბენის სიგრძე მნიშვნელოვნად აღემატება მაგნიტურ ველში მისი ტრაექტორიის სიმრუდის რადიუსს, ანუ რაც იგივეა, რელაქსაციის დრო მნიშვნელოვნად აღემატება ბრუნვის პერიოდს $T = 2\pi n^* e^{-1} B^{-1}$, ე.ი. (5.2) გამოსახულების გათვალისწინებით ძლიერი ველისას

$$\frac{m^* \mu}{e} \gg \frac{2\pi n^*}{eB} \quad \text{ანუ} \quad \mu B \gg 1. \quad (5.39)$$

თუ მხედველობაში მივიღებთ მუხტის გადამტანების ძვრადობის ტემპერატურულ დამოკიდებულებას, ტემპერატურის შემცირებამ შეიძლება კრისტალზე მოქმედი სუსტი მაგნიტური ველი ძლიერი გახადოს.

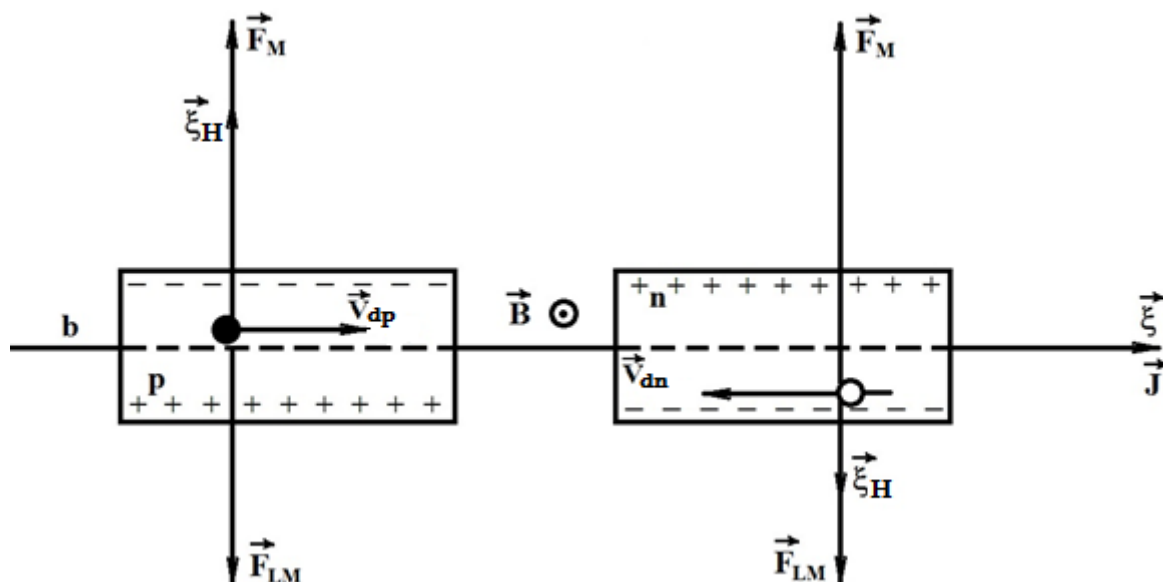
5.7. ჰოლის ეფექტი

გალვანომაგნიტურ მოვლენებს შორის ჰოლის ეფექტი გამოირჩევა თავისი უადრესად დიდი მეთოდური და პრაქტიკული მნიშვნელობით. მაგალითად, ერთის მხრივ, იგი წარმოადგენს ყველაზე ფართოდ გავრცელებულ მეთოდს მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის დასადგენად. ხოლო მეორეს მხრივ, ჰოლის ეფექტზე დაყრდნობით მოქმედებენ მაგნიტური ველის მზომი კომპაქტური გადამწოდები. აღსანიშნავია ისიც, რომ ჰოლის ეფექტი ყოველთვის თან ახლავს ნებისმიერ გალვანომაგნიტურ მოვლენას.

ჰოლის ეფექტს საფუძვლად უდევს ელექტრულ და მაგნიტურ ველებში მოთავსებულ კრისტალში მოძრავი მუხტის გადამტანის რეაგირება ლორენცის ძალის მოქმედებაზე

$$\vec{F}_L = \vec{F}_\xi + \vec{F}_{LM} = e\vec{\xi} + e[\vec{V}_d \cdot \vec{B}]. \quad (5.40)$$

პროცესის მიმდინარეობა სქემატურად განხილულია 5.11. ნახაზზე b სიგანისა და d სისქის, n და p ტიპის ნახევრად გამტარებისათვის. დრეიფში მონაწილე მუხტის გადამტანების გადახრა \vec{F}_{LM} ძალის გავლენით, განაპირობებს $\vec{\xi}$ და \vec{B} ვექტორებისადმი მართობული კრისტალოგრაფიული მიმართულების გასწვრივ მუხტების განცალკევების და, შედეგად, $\vec{\xi}_H$ დაძაბულობის ჰოლის ველის (ანუ შესაბამის წახნაგებს შორის U_H ჰოლის ძაბვის) აღძვრას.



ნახა. 5.11. ჰოლის ეფექტის განმსაზღვრელი პროცესების სქემა p და n ტიპის ნახევრად გამტარებისათვის

მუხტების განცალკევებით შექმნილი ჰოლის ელექტრული ველი თავადაც ჩაერევა ამ პროცესში და მუხტების დაგროვება წახნაგებზე შეწყდება, როდესაც ეს ველი მიაღწევს ისეთ მნიშვნელობას, რომ მისი მხრიდან მუხტის გადამტანზე მოქმედი \vec{F}_M ძალა შეძლებს განცალკევების განმაპირობებელი \vec{F}_{LM} ლორენცის ძალის გაკომპენსირებას. სწორედ ამ

$$\vec{F}_M = -\vec{F}_{LM} \quad (5.41)$$

პირობის გამოყენებით შესაძლებელია მარტივად მივიღოთ პროცესის მახასიათებელი პარამეტრების დამაკავშირებელი ისეთი გამოსახულება, რომელიც კრისტალში მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის დადგენის საშუალებას იძლევა.

თუ ჩავთვლით, რომ ყველა მუხტის გადამტანს ერთნაირი სიჩქარე გააჩნია (მაგალითად, ძლიერად გადაგვარებულ ნახევრად გამტარში), მაშინ $\vec{V}_d = \frac{J}{en}$ დრეიფული სიჩქარის და (5.40) გამოსახულებების (5.41)-ში გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$\xi_H = \frac{1}{en} JB = R_H JB. \quad (5.42)$$

მოსახერხებელია (5.42)-ის ჩაწერა ჰოლის ძაბვისათვის კრისტალში გამავალი დენის ძალის გამოყენებით ($I = Jbd$):

$$U_H = R_H \frac{IB}{d}. \quad (5.43)$$

შემოტანილი ჰოლის კოეფიციენტი $R_H = \frac{1}{en}$ გამოსახულება მართებულია მაშინაც, თუ სიჩქარეთა ტოლობის პირობა არ სრულდება, მაგრამ მუხტის გადამტანების რელაქსაციის დრო სიჩქარეზე არაა დამოკიდებული, ან ძლიერია მაგნიტური ველი. ყველა სხვა შემთხვევაში გათვალისწინებული უნდა იყოს მუხტის გადამტანების გაბნევის კონკრეტული მექანიზმი, რაც A ჰოლ-ფაქტორის მეშვეობით ხორციელდება (ცხრილი 5.1)

$$R_H = \frac{A}{en}. \quad (5.44)$$

თუ ცნობილი იქნება ჰოლის კოეფიციენტი, მაშინ კონცენტრაციასთან ერთად განსაზღვრული იქნება გამტარობის ტიპიც. ვინაიდან ელექტრონული და ხვრელური გამტარობისათვის ჰოლის მუდმივას განსხვავებული ნიშნები ექნებათ.

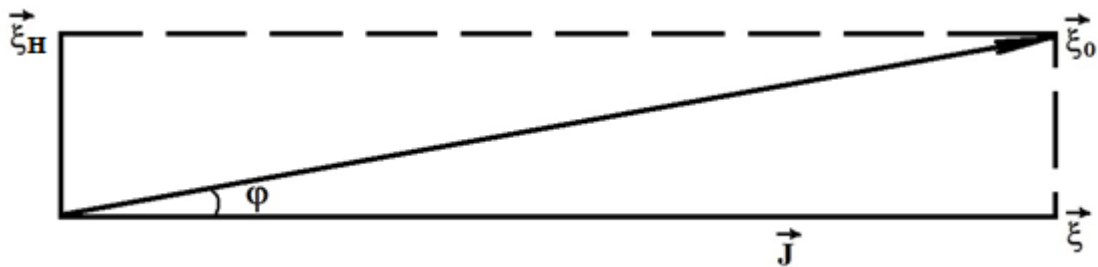
კრისტალში შექმნილი ჯამური ველის დაძაბულობა $\vec{\xi}_o = \vec{\xi} + \vec{\xi}_H$ ჰოლის φ კუთხეს ადგენს საწყისი ელექტრული ველის $\vec{\xi}$ დაძაბულობის ვექტორთან (ნახ .5.12). მაგრამ ჰოლის \vec{F}_H და ლორენცის \vec{F}_{LM} ძალების კომპენსაციის გამო

მუხტის გადამტანები კვლავ წრფივად მოძრაობენ – სტაციონალურ პირობებში ისინი მხოლოდ $\vec{\xi}$ ველის ზეგავლენზე რეაგირებენ.

ცხრილი 5.1

ჰოლ-ფაქტორის მნიშვნელობები სხვადასხვა გაბნევის მექანიზმებისას

	N	I	$O(T < \Theta)$	$O(T > \Theta)$	A
r	$-\frac{1}{2}$	2	$\frac{1}{2}$	1	0
A	1	1,93	0,99	1,11	1,17



ნახ. 5.12. ჰოლის კუთხე და დენის მიმართულება სტაციონარულ პირობებში მყოფი კრისტალისათვის

ნახ.5.12 და (5.42) თანაფარდობის შესაბამისად

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\vec{\xi}_H}{\vec{\xi}} = \frac{R_H JB}{\xi} = R_H \sigma B. \quad (5.45)$$

სუსტი მაგნიტური ველისას φ ჰოლის კუთხეც მცირეა და

$$R_H \sigma = \frac{\operatorname{tg} \varphi}{B} \approx \frac{\varphi}{B}. \quad (5.46)$$

აქ R_H და σ კინეტიკური კოეფიციენტების მნიშვნელობების გათვალისწინებით, მივიღებთ

$$A\mu \approx \frac{\varphi}{B}. \quad (5.47)$$

დრეიფული ძვრადობის ნამრავლს ჰოლ-ფაქტორზე ჰოლის ძვრადობას უწოდებენ

$$\mu_H = A\mu = R_H \sigma \approx \frac{\varphi}{B}. \quad (5.48)$$

მაშასადამე, ჰოლის ეფექტის შესწავლა საშუალების გვაძლევს (R_H და σ განსაზღვრის გზით) ვიმსჯელოთ მუხტის გადამტანების ძვრადობაზეც მინარეულ ნახევრად გამტარში. თუმცა, დადგენილი ჰოლის ძვრადობა შეიძლება A -ჯერ აღემატებოდეს დრეიფულ ძვრადობას.

თუ კრისტალში შერეული გამტარობა ხორციელდება, მაშინ ჰოლის ეფექტის ანალიზი მნიშვნელოვნად რთულდება. ლორენცის ძალის გავლენით ელექტრონებიც და ხვრელებიც ერთი წახნაგისაკენ გადაიხრებიან (ნახ. 5.11). ამიტომ,

დაგროვებული მოცულობითი მუხტი შედარებით მცირე იქნება. ამავე დროს, მუხტების სრული ურთიერთკომპენსაცია არ არის ალბათური (ტოლი კონცენტრაციის პირობებშიც), ელექტრონების და ხვრელების განსხვავებული ძვრადობის გამო. სტაციონარული მდგომარეობა მიიღწევა, როდესაც მოხდება ელექტრონების და ხვრელების ნაკადების გათანაბრება, ერთი ნიშნის მუხტის გადამტანებზე აღძრული ჰოლის ველის ამჩქარებელი, ხოლო მეორეზე დამამუხრუჭებელი ზეგავლენის გამო. ჰოლის კოეფიციენტისათვის გვექნება

$$R_H = \frac{A_p p \mu_p^2 - A_n n \mu_n^2}{e(n\mu_n + p\mu_p)^2} = \frac{A}{e} \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{(n\mu_n + p\mu_p)^2}. \quad (5.49)$$

აქ გათვალისწინებულია, რომ გადაუგვარებულ ნახევრად გამტარში

$$A_p = A_n = A. \text{ საკუთარი ნახევრად გამტარისათვის } \frac{\mu_n}{\mu_p} = b \text{ აღნიშვნის გამოყენებით}$$

მივიღებთ

$$R_H = \frac{A}{en} \frac{1-b}{1+b}. \quad (5.50)$$

შერეული გამტარობისას ჰოლის კოეფიციენტის (ისევე როგორც ზეებეკის S კოეფიციენტის) ნიშანი ცალსახად ვერ განსაზღვრავს მუხტის ძირითადი გადამტანების ტიპს, არამედ გამტარობის პრიორიტეტულ გვარობაზე მიგვანიშნებს მხოლოდ. ცდით დადგენილი ჰოლის ძვრადობა კი დაკავშირებულია ელექტრონების და ხვრელების ჰოლის ძვრადობასთან შემდეგი გამოსახულებით:

$$\mu_H = \frac{\sigma_p \mu_{Hp} - \sigma_n \mu_{Hn}}{\sigma_n + \sigma_p}. \quad (5.51)$$

საკუთარი ნახევრად გამტარისათვის, $A_n = A_p$ დაშვების გათვალისწინებით მივიღებთ

$$\mu_H = \frac{\mu_{Hp} - b\mu_{Hn}}{1+b} = \frac{A(\mu_p - b\mu_n)}{1+b} = \frac{A(1-b^2)\mu_p}{1+b} = (1-b^2)\mu_{Hp}. \quad (5.52)$$

ამრიგად, ჰოლის ეფექტის შესწავლა საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ მუხტის თავისუფალი გადამტანების კონცენტრაცია და ძვრადობა, ხოლო ჰოლის კოეფიციენტის ტემპერატურული დამოკიდებულებით ($\ln RT^{-1}$ გრაფიკის მეშვეობით), მარტივად და მაღალი სიზუსტით დავადგენთ აქტივაციის ენერგიას (აკრძალული ზონის სიგანეს, თუ მინარევის იონიზაციის ენერგიას ტემპერატურული ინტერვალის მიხედვით).

5.8. გაუსის ეფექტი

გაუსის, ანუ გრძივი მაგნიტოწინააღმდეგობის ეფექტს საფუძვლად უდევს დრეიფში მონაწილე მუხტის გადამტანების ტრაექტორიის გამრუდება ($r = m^*V/eB$ სიმრუდის რადიუსით) მაგნიტური ველის გავლენით. თავისუფალი განარბენის სიგრძე გარეშე ელექტრული ველის მიმართულების გასწვრივ მცირდება

$$l_x = l \cos \varphi \approx l(1 - 0,5\mu_H^2 B^2), \quad (5.53)$$

და შესაბამისად იზრდება წინააღმდეგობა, მაგრამ მოვლენის რეალური, თვისობრივი ახსნა, კი გაცილებილ უფრო ღრმა ფიზიკურ მიდგომას მოითხოვს.

ურთიერთმართობ ელექტრულ და მაგნიტურ ველებში მოთავსებულ კრისტალში დრეიფში მონაწილე მუხტის გადამტანი გრძნობს არა მარტო ტრაექტორიის გამამრუდებელი ლორენცის ძალის მოქმედებას, რომლის გავლენითაც ის უნდა შემობრუნდეს

$$\varphi \approx \frac{l}{r} = eB \frac{\tau}{m^*} \quad (5.54)$$

კუთხით, არამედ მაკომპენსირებელი ჰოლის ძალის ზეგავლენასაც. ყველა მუხტის გადამტანი რელაქსაციის დროის ეფექტურ მასასთან ერთნაირი ფარდობით რომ ხასიათდებოდეს, მაშინ თითოეულ გადამტანზე მოდულით ტოლი ლორენცის და ჰოლის ძალები იმოქმედებდა და აღსდგებოდა მოძრაობა საწყისი ელექტრული ველის მიმართულებით (ცხადია, უცვლელი დარჩებოდა წინააღმდეგობაც). ამრიგად, გაუსის ეფექტი აღიძვრება, მხოლოდ მაშინ, თუ კრისტალში არსებობენ განსხვავებული $\frac{\tau}{m^*}$ ფარდობის მქონე მუხტის გადამტანები, რაც თავის მხრივ, მათი ენერჯის (სიჩქარის) მიხედვით გარკვეული განაწილებით და τ -ს ენერჯიაზე დამოკიდებულებით არის გამოწვეული. ამ შემთხვევაში ჰოლის ველი მხოლოდ გარკვეული, საშუალო მნიშვნელობის კუთხით გადახრის აღმოფხვრას შეძლებს. მუხტის გადამტანებზე მოქმედი ჰოლის ძალა ტოლი იქნება საშუალო დრეიფული სიჩქარის შესაბამისი ლორენცის ძალისა. საშუალო გადახრის კუთხეზე მეტად ან ნაკლებად გადახრილი (ე.ი. საშუალო სიჩქარისაგან განსხვავებული დრეიფული სიჩქარით მოძრავი) მუხტის გადამტანის თავისუფალი განარბენის სიგრძე, გარეშე ელექტრული ველის მიმართულებით, შემცირდება და მაგნიტური ველის პირობებში არსებული ρ_B წინააღმდეგობას მეტი იქნება საწყის ρ_0 წინააღმდეგობაზე.

გაუსის ეფექტი აიწერება მაგნიტოწინააღმდეგობის x კინეტიკური კოეფიციენტით

$$\frac{\rho_B - \rho_0}{\rho_0} = \chi B^2 \quad (5.55)$$

χ მუდმივაა სუსტი მაგნიტური ველისას და მისი სიდიდე მუხტის გადამტანების დრეიფული ძვრადობით და გაბნევის მექანიზმებით განისაზღვრება

$$\chi = \mu^2 (C - A^2) \quad (5.56)$$

აქ C აღწერს ელექტრონის (ან ხვრელის) ტრაექტორიის გამრუდებას მაგნიტური ველით, ხოლო A ჰოლ-ფაქტორით ჰოლის ველის მაკომპენსირებელი ზეგავლენის გათვალისწინება ხდება.

საკუთარ ნახევრად გამტარში (5.56) შემდეგ სახეს მიიღებს:

$$\chi = \mu_p^2 [C(1+b^3)(1+b)^{-1} - A^2(1-b^2)] \quad (5.57)$$

ძლიერ მაგნიტურ ველში მაგნიტოწინააღმდეგობის კოეფიციენტი მცირდება $1/b^2$ -ის პროპორციულად, რის გამოც, თუ სუსტ ველში წინააღმდეგობა იზრდებოდა ძლიერ ველში ის აღწევს ნაჯერობას. აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას, ნაჯერობა წინააღმდეგობის 12 %-ის ტოლი ცვლილებისას მიიღწევა.

$$\rho_B = \rho_0 (1 + \chi B^2) \quad (5.58)$$

მაგნიტოწინააღმდეგობის მთელი რიგი ცნობილი ანომალიების განხილვა და განსაკუთრებით ახსნა სცილდება წარმოდგენილი კურსის ჩარჩოებს. აღვნიშნავთ მხოლოდ, რომ წინააღმდეგობის შესაძლო ცვლილებას, პარალელური მაგნიტური და ელექტრული ველების პირობებში, უკავშირებენ ზონების შედარებით რთული იზოენერგეტიკული ზედაპირების არსებობას, ხოლო უარყოფით მაგნიტოწინააღმდეგობას (მის შემცირებას მაგნიტურ ველში) – მინარეული მდგომარეობის ზეგავლენას.

5.9. ეტინგსჰაუზენისა და ნერნსტის ეფექტები

მუხტის გადამტანების განაწილება სიჩქარის მიხედვით და ამდენად, განსხვავებული τ/m^* ფარდობის მქონე გადამტანების არსებობა (ურთიერთმართობულ მაგნიტურ და ელექტრულ ველებში მოთავსებულ კრისტალში), არა მარტო წინააღმდეგობის ცვლილებას, არამედ ელექტრული ველისადმი მართობული და პარალელური მიმართულებებით ტემპერატურული გრადიენტების აღძვრასაც განაპირობებს.

ვინაიდან, ლორენცის და ჰოლის ძალები სტაციონარულ პირობებში აწონასწორებენ ერთმანეთს, მხოლოდ საშუალო დრეიფული სიჩქარით მოძრავი მუხტის

გადამტანებისათვის, ამიტომ, ამ საშუალო სიჩქარესთან შედარებით სწრაფად და ნელა მოძრაობა (მეტი და ნაკლები ენერჯის) მუხტები გადაიხრებიან ლორენცის და ჰოლის ძალების მოქმედების წრფის გასწვრივ, კრისტალის მოპირდაპირე წახნაგებისაკენ და წახნაგების ტემპერატურათა სხვადასხვაობას გამოიწვევენ, ამრიგად, გაჩნდება განივი ტემპერატურული გრადიენტი (ეტინგსჰაუზის ეფექტი)

$$\nabla_{\perp} T = A^E J_x B_z \quad (5.59)$$

A^E – ეტინგსჰაუზენის კინეტიკური კოეფიციენტი მუხტის გადამტანების ძვრადობასა და გაბნევის მექანიზმზე, აგრეთვე კრისტალის სითბოგამტარობაზე დამოკიდებული

$$A^E = \frac{k_0 T}{e} \frac{\mu_H (r - 0,5)}{\chi_e - \chi_q} \quad (5.60)$$

ზემო განხილულის შესაბამისად, გაბნევის მექანიზმის და, ე.ი. τ -ს ენერჯიაზე (5.60) დამოკიდებულების მიხედვით განისაზღვრება ეფექტის ნიშანი. მართლაც, (5.60) ძალით, $A^E > 0$ იონიზირებულ მინარევებზე გაბნევისას ($r=2$) და $A^E < 0$ აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას ($r=0$).

გრძივი ტემპერატურული გრადიენტის აღძვრა (ნერნსტის ეფექტი)

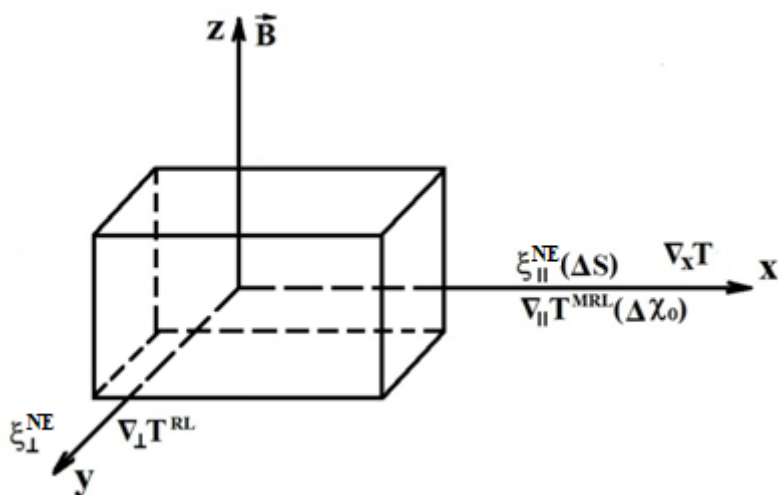
$$\nabla_{\parallel} T = A^N J_x B_z^2 \quad (5.61)$$

შედგება დრეიფში მონაწილე სხვადასხვა სიჩქარის მქონე მუხტის გადამტანების განსხვავებული დამუხრუჭებისა მაგნიტურ ველში. განსხვავებული აღმოჩნდება კრისტალის მოპირდაპირე წახნაგებზე (დენის მიმართულების გასწვრივ) მუხტის გადამტანებით დაგროვებული სითბური ენერჯიაც. A^N – ნერსტის კოეფიციენტის ნიშანიც. A^E მსგავსად, გაბნევის მექანიზმზეა დამოკიდებული. თუ $r > 1/2$, მაშინ მეტი ენერჯის მუხტების წვლილი დენში მცირდება და კრისტალის ტემპერატურა იკლებს მუხტის გადამტანების მოძრაობის მიმართულებით. როდესაც $r < 1/2$ უფრო ძლიერად მუხრუჭდება ნელი გადამტანები და მათი მოძრაობის მიმართულებით კრისტალის ტემპერატურა მატულობს.

დაბალ ტემპერატურაზე ($T < \Theta$), ოპტიკურ ფონონებზე გაბნევისას $r = 1/2$, τ რელაქსაციის დრო ენერჯიაზე დამოკიდებული არ არის (5.60) და ეტინგსჰაუზენის და ნერსტის ეფექტები არ აღიძვრება.

5.10 თერმომაგნიტური მოვლენები

მუხტების მიმართული მოძრაობა განაპირობებს არა მარტო ელექტროგამტარობას, არამედ სითბოგამტარობასაც. ამიტომ, თუ მაგნიტურ ველში მოვათავსებთ კრისტალს, რომელშიც არსებობს ტემპერატურული გრადიენტით განპირობებული ენერჯიის მიმართული ნაკადი, აღიძვრება გალვანომაგნიტური ეფექტების ანალოგიური ოთხი თერმომაგნიტური მოვლენა (ნახ. 5.13.).



ნახ. 5.13. თერმომაგნიტური პროცესების სქემატური წარმოდგენა

- 1) საწყისი $\nabla_x T$ ტემპერატურული გრადიენტის და B_z მაგნიტური ველის მიმართ მართობული ელექტრული ველის ξ_{\perp}^{NE} აღძვრა, ანუ ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის განივი ეფექტი;
- 2) საწყისი $\nabla_x T$ ტემპერატურული გრადიენტის გასწვრივ ელექტრული ველის ξ_{\parallel}^{NE} აღძვრა (რაც ამ მიმართულებით ზეებეკის კოეფიციენტის ცვლილების გამომხატველია), ანუ ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის გრძივი ეფექტი;
- 3) საწყისი $\nabla_x T$ ტემპერატურული გრადიენტის და B_z მაგნიტური ველის მიმართ მართობული $\nabla_{\perp} T$ ტემპერატურული გრადიენტის აღძვრა, ანუ რიგი – ლედიუკის ეფექტი (ჰოლის ეფექტის სითბური ანალოგი).
- 4) საწყისი $\nabla_x T$ ტემპერატურული გრადიენტის გასწვრივ კიდევ ერთი ტემპერატურული გრადიენტის $\nabla_{\parallel} T$ აღძვრა (რაც ამ მიმართულებით სითბოგამტარობის კოეფიციენტის ცვლილების გამომხატველია), ანუ მაჯი – რიგი – ლედიუკის ეფექტი (გაუსის ეფექტის სითბური ანალოგი).

თერმომაგნიტური პროცესების ასხნა ემყარება კრისტალში მიმართულად მოძრავი, შედარებით სწრაფი (მეტი ენერჯიის) და ნელი მუხტის გადამტანების

არსებობას, მათი რელაქსაციის დროის ენერგიაზე დამოკიდებულებას, რის გამოც ისინი განსხვავებული კუთხეებით (5.54) გადაიხრებიან მაგნიტურ ველში. ისევე, როგორც ვალვანომაგნიტური მოვლენების შემთხვევაში, განივი ეფექტები კენტია, ხოლო გრძივი – ლუწი.

5.2 პარაგრაფში ნაჩვენებია იყო, რომ ტემპერატურული გრადიენტის პირობებში სტაციონარული მდგომარეობა მიიღწევა, როდესაც აღძრული თერმოელექტრული ველი გრადიენტის თანამიმართული „ცივი“ მუხტების დრეიფული ნაკადით გააკომპენსირებს „ცხელი“ გადამტანების დიფუზურ ნაკადს (ნახ. 5.3). მაგნიტური ველის მოდებისას, დიფუზიაში და დრეიფში მონაწილე მუხტის გადამტანები, ლორენცის ძალის გავლენით, კრისტალის მოპირდაპირე წახნაგებისაკენ გადაიხრებიან. ვინაიდან ისინი, როგორც წესი, სხვადასხვა რელაქსაციის დროით ხასიათდებიან, მათი გადახრის კუთხეები განსხვავებული აღმოჩნდება. შედეგად, წახნაგებზე ერთი ნიშნის, არა ტოლი მუხტები დაგროვდება, გაჩნდება განივი ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის ξ_{\perp}^{NE} ელექტრული ველი (ნახ. 5.14.), რომელიც გარკვეული მნიშვნელობის მიღწევისას თავად შეძლებს აღკვეთოს მუხტების შემდგომი დაგროვება (მაკომპენსირებელი საკუთარი ნაკადით). ეფექტი აღიწერება ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის A_{\perp}^{NE} განივი კინეტიკური კოეფიციენტით,

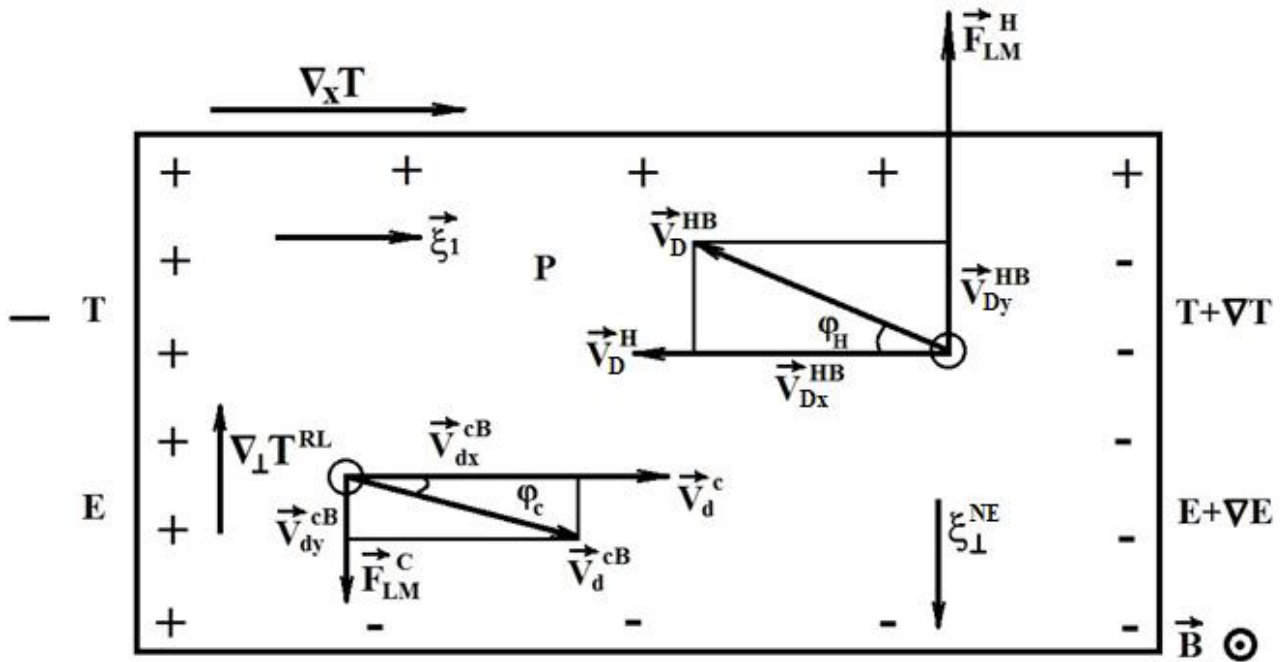
$$\xi_{\perp}^{NE} = A_{\perp}^{NE} \nabla_x T B_z. \quad (5.62)$$

რომლის სიდიდე, სფერული სიმეტრიის ზონის მქონე გადაუგვარებელი ნახევრად გამტარისათვის პოლის ძვრადობით და გაბნევის მექანიზმით განისაზღვრება, ხოლო ნიშანი – „ცხელი“ და „ცივი“ მუხტის გადამტანების რელაქსაციის დროთა ($\tau_H - \tau_C$) სხვაობაზეა დამოკიდებული. როდესაც $r > \frac{1}{2}$ (გაბნევა იონიზირებულ მინარევებზე ან ოპტიკურ ფონონებზე), სწრაფი გადამტანები მეტი კუთხით გადაიხრებიან (რადგან $\tau_H > \tau_C$) და ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის ველს ექნება ერთი მიმართულება, ხოლო თუ $r < \frac{1}{2}$ (ე.ი. $\tau_H < \tau_C$), მაშინ ξ_{\perp}^{NE} -თვის გამოვლინდება საპირისპირო ნიშანი („ცივი“ გადამტანები მეტად იხრებიან, მაგალითად, აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას)

$$A_{\perp}^{NE} = \frac{k_0}{e} \mu_H \left(r - \frac{1}{2} \right). \quad (5.63)$$

პოლის მოვლენისაგან განსხვავებით, ეფექტის ნიშანი არ არის დამოკიდებული მუხტის გადამტანების ტიპზე და შერეული გამტარობისას ელექტრონების და ხვრელების წვლილი ჯამდება. მართლაც, ტემპერატურული გრადიენტის გავლენით ელექტრონებიც და ხვრელებიც ერთი მიმართულებით დიფუნდირებენ,

ლორენცის ძალა მათ საპირისპირო მიმართულებით გადახრის და ამიტომ, მათ მიერ შექმნილი ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის ველების დაძაბულობები შეიკრიბება.



ნახ. 5.14 განივი ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის და რიგი-ლედის ეფექტების აღძვრა

(მაგალითისათვის აღებულია p -ტიპის ნახევრად გამტარი და $r > 1/2$. \vec{V}_D^H და \vec{V}_D^{HB} – დიფუზიაში მონაწილე „ცხელი“ ხვრელების სიჩქარე, შესაბამისად $B = 0$ და $B > 0$ პირობებში. დრეიფში ჩაბმული „ცივი“ ხვრელებისათვის ანალოგიურად \vec{V}_d^C და \vec{V}_d^{CB})

ვინაიდან დიფუზიაში და დრეიფში „ცხელი“ და „ცივი“ მუხტის გადამტანები ლორენცის ძალის გავლენით კრისტალის მოპირდაპირე წახნაგებისაკენ გადაიხრებიან, ან წახნაგების ტემპერატურა განსხვავებულად შეიცვლება – განხდება რიგი-ლედის განივი ტემპერატურული გრადიენტი

$$\nabla_{\perp} T^{RL} = A^{RL} \nabla_x T B_z. \quad (5.64)$$

აღსანიშნავია, რომ $\nabla_{\perp} T^{RL}$ ნულისაგან განსხვავებული იქნება მაშინაც, როდესაც „ცხელი“ და „ცივი“ მუხტის გადამტანების გადახრის კუთხეები ერთნაირია (τ -ს ენერგიაზე დამოუკიდებლობის გამო, მაგალითად, $r = 1/2$ გაბნევის ფაქტორისას), ხოლო A^{RL} რიგი-ლედის კინეტიკური კოეფიციენტის ნიშანი მუხტის გადამტანის ტიპზეა დამოკიდებული და, ამიტომ შერეული გამტარობისას ეფექტი სუსტად იქნება გამოვლენილი. სფერული სიმეტრიის დაშვებული ზონის მქონე გადაუგვარებელი ნახევრად გამტარისათვის, შესაბამისად, სუსტი და ძლიერი მაგნიტური ველების შემთხვევაში.

$$A^{RL} \sim \frac{\sigma}{\chi_e + \chi_q} \mu_H T, \quad (5.65)$$

$$A^{RL} = \frac{5}{2} \left(\frac{k_0}{e} \right)^2 \frac{\sigma}{\chi_q} \frac{T}{B^2}. \quad (5.66)$$

გამომდინარე (5.66)-დან, ძლიერი მაგნიტური ველისას, რიგი-ლედუკის კოეფიციენტი არ არის დამოკიდებული გაბნევის მექანიზმზე და სითბოგამტარობის მხოლოდ ფონონური წვლილით განისაზღვრება. სწორედ ამიტომ, რიგი-ლედუკის ეფექტი χ_q -ს დადგენის ერთ-ერთ ძირითად, პირდაპირ მეთოდს წარმოადგენს (ცხადია, ეს მოხერხდება, თუ კრისტალში მუხტის გადამტანების ძვრადობა მაღალია და მარტივად მიიღწევა $\mu b \gg 1$ პირობა).

$\nabla_x T$ საწყისი ტემპერატურული გრადიენტის გასწვრივ, როგორც დიფუზიაში, ასევე დრეიფში მონაწილე მუხტის გადამტანების თავისუფალი განარბენის სიგრძის და სიჩქარეთა ცვლილება, მაგნიტური ველის ტრაექტორიის გამამრუდებელი ზეგავლენის გამო, ცხადია, ცვლის გრძივი გადატანითი პროცესების აღმწერ კინეტიკურ კოეფიციენტებსაც. კერძოდ, l -ის შემცირება უშუალოდ განაპირობებს მაჯი-რიგი-ლედუკის მოვლენას – იცვლება ელექტრონული სითბოგამტარობის კოეფიციენტი $\Delta \chi_e^{MRL}$, $\Delta \chi_e^{MRL} = A^{MRL} \chi_e B_z^2$ საწყისი $\nabla_x T$ ტემპერატურული გრადიენტი, ე.ი. ფაქტიურად აღიძვრება დამატებითი $\nabla_{//} T^{MRL}$ გრადიენტი „ცხელ“ და „ცივ“ მუხტის გადამტანთა სიჩქარეთა

$$(V_D^H - V_d^C) \quad (5.67)$$

სხვაობის (რომელიც თერმო ემ ძალის სიდიდის განმსაზღვრელია სტაციონარულ პირობებში) მგრძნობიარობა მაგნიტური ველის მიმართ განაპირობებს ზეებეკის S კოეფიციენტის (თერმოელექტრული ველის) ცვლილებას, რაც დამატებით ნერნსტ-ეტინგსჰაუზენის გრძივი ველის $\xi_{//}^{NE}$ აღძვრას ნიშნავს

$$\xi_{//}^{NE} = A_{//}^{NE} S \nabla_x T B_z^2 \quad (5.68)$$

და

$$A_{//}^{NE} = \frac{1}{B_z^2} \frac{S - S(B)}{S}. \quad (1.69)$$

ელექტრონული სითბოგამტარობა მაგნიტურ ველში მცირდება ყოველთვის, მაშინაც კი, როდესაც τ არ არის დამოკიდებული ენერგიაზე ($r = 1/2$). თერმო ემ ძალა მცირდება თუ τ ენერგიის ზრდადი ფუნქციაა ($r > 1/2$) და იზრდება როდესაც კლებადია ($r < 1/2$). აღსანიშნავია აგრეთვე, რომ ძლიერ მაგნიტურ ველში თერმო ემ ძალა ნაჯერობას აღწევს და გაბნევის მექანიზმისაგან დამოუკიდებელი ხდება.

ობიექტური მოვლენები ნახევრად გამტარებში

6.1. ობიექტური პარამეტრები და კავშირი მათ შორის

როგორც უკვე ვნახეთ, ნახევრად გამტარებში მიმდინარე პროცესები ორი განსხვავებული პოზიციიდან შეიძლება შევაფასოთ: ჯერ ერთი, მოვლენის შეფასების კრიტერიუმად გამოვიყენოთ მასზე დაფუძნებული ხელსაწყო შექმნის შესაძლებლობა, მისი მუშაობის ეფექტურობის საკითხი (მაგ: თერმოელექტრულ მოვლენაზე დაყრდნობით მოქმედებენ ტემპერატურის გამზომი ხელსაწყოები, პელტიეს ეფექტზე – მაცივრები, თერმიული გენერატორები და ა.შ.) და მეორეც, ამა თუ იმ ეფექტის მნიშვნელობაზე მსჯელობისას გავითვალისწინოთ, თუ რამდენად გამოდგება იგი, როგორც ნახევრად გამტარის თვისებების შესწავლის მეთოდი (მაგ, ჰოლის ეფექტი ფართოდ გამოიყენება ნახევრად გამტარებში მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის დასადგენად; ელექტროგამტარობის შესწავლა აქტივაციის ენერჯის დასადგენი მარტივი საშუალებაა და ა. შ.).

აქედან გამომდინარე, ნახევრად გამტარებში მიმდინარე ობიექტური მოვლენები განსაკუთრებულ მნიშვნელობას იძენენ: ჯერ ერთი, მათ საფუძველზე მრავალი, ტექნიკაში ფართოდ გამოყენებული ხელსაწყო მუშაობს; მეორეს მხრივ, ობიექტური მოვლენები წარმოადგენს საკმაოდ ხელმისაწვდომ და, რაც მთავარია, მაღალი სიზუსტის მეთოდებს ნახევრად გამტარების ისეთი მნიშვნელოვანი პარამეტრების დასადგენად, როგორცაა აკრძალული ზონის სიგანე, ეფექტური მასა და სხვ.

კრისტალში მიმდინარე ყველა ობიექტური პროცესის დახასიათება ზოგადად, შესაძლებელია სულ სამი – ოთხი პარამეტრის მეშვეობით, მაგრამ პრაქტიკული გამოთვლების გასაიოლებლად ფართოდ გავრცლებული ობიექტური პარამეტრების რიცხვი გაცილებით დიდია.

სამივე ძირითადი ობიექტური მოვლენა – გარდატეხა, არეკვლა, შთანთქმა–შეიძლება აღიწეროს კომპლექსური გარდატეხის მაჩვენებლით ან კომპლექსური დიელექტრიკული შეღწევადობით (დიელექტრიკული ფუნქციით):

$$n^* = n - ik, \tag{6.1}$$

$$\varepsilon = (n - ik)^2 = \varepsilon_1 - i \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega} = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2. \tag{6.2}$$

ამ გამოსახულებების ნამდვილი ნაწილები - n გარდატეხის მაჩვენებელი და ε დიელექტრიკული შეღწევადობა ძირითადად აღწერენ გარდატეხისა და არეკვლის პროცესებს, ხოლო კოეფიციენტები წარმოსახვით ნაწილებთან - k

შთანთქმის მაჩვენებელი (ექსტინციის კოეფიციენტები) ε_2 , და ზოგიერთ შემთხვევაში ელექტროგამტარობა σ გამოიყენება შთანთქმის პროცესების აღწერისას. $\omega = 2\pi\nu$ ელექტრომაგნიტური ტალღის სიხშირეა, ხოლო ε_0 – ელექტრული მუდმივა. ცხადია, რომ

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2. \quad (6.3)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk = \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \omega}. \quad (6.4)$$

ოპტიკური პროცესების ექსპერიმენტული შესწავლისას, ზემოთ აღნიშნული პარამეტრების უშუალო დადგენა გაძნელებულია. ამიტომ, შემოტანილია კიდევ შთანთქმის კოეფიციენტის α , არეკვლის კოეფიციენტის R და გამჭვირვალობის T ცნებები. შთანთქმის კოეფიციენტი ახასიათებს კრისტალის ერთეულოვან სისქეზე ფოტონის შთანთქმის ალბათობას (გარემოში $1/\alpha$ მანძილის გავლისას ტალღა სუსტდება e -ჯერ) და დაკავშირებულია შთანთქმის მაჩვენებელთან შემდეგი გამოსახულებით:

$$\alpha = \frac{2\pi k}{\lambda} = \frac{2\omega k}{c} = \frac{\omega \varepsilon_2}{cn} = \frac{1}{\varepsilon_0 c n} \sigma, \quad (6.5)$$

სადაც λ სინათლის ტალღის სიგრძეა, მაგრამ ექსპერიმენტულად პირდაპირ არც შთანთქმის კოეფიციენტი განისაზღვრება. ექსპერიმენტი საშუალებას გვაძლევს ადვილად ვიპოვოთ არეკვლის კოეფიციენტი R და გამჭვირვალობა T , ხოლო შემდგომ მათი საშუალებით გავიანგარიშოთ სხვა ოპტიკური პარამეტრები (სინათლის ნორმალური ან მასთან მიახლოებული დაცემისას და ინტერფერენციული ეფექტების უგულებელყოფისას)

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}. \quad (6.6)$$

$$T = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1 - R^2 e^{-2\alpha d}}, \quad (6.7)$$

სადაც d კრისტალის სისქეა, ხოლო R -სა და T -ს გააჩნიათ შემდეგი მარტივი აზრი: არეკვლის კოეფიციენტი R არის კრისტალის ზედაპირიდან არეკვლილი სინათლის I ინტენსივობის ფარდობა დაცემულ I_0 ინტენსივობასთან

$$R = \frac{I}{I_0} \quad (6.8)$$

და გამჭვირვალობა T – კრისტალიდან გამოსული სინათლის ინტენსივობის I ფარდობა დაცემულთან

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (6.9)$$

(6.6)-დან გამომდინარე არეკვლის კოეფიციენტი დამოკიდებულია შთანთქმის კოეფიციენტზე, შთანთქმის ზრდისას იზრდება არეკვლაც $R \approx 1$, როცა $k \gg 1$, ე.ი. ადგილი აქვს დაცემული სინათლის თითქმის სრულ არეკვლას. ამით აიხსნება ლითონების მიერ სინათლის ძლიერი არეკვლა (ლითონური ბრწყინვა). ამგვარად, თუ სპექტრის გარკვეულ უბანში ნივთიერება ძლიერი შთანთქმით ხასიათდება, მაშინ ამავე უბანში, იგი ძლიერად ირეკლავს დაცემულ სინათლეს. ამავე დროს (6.6) გამოსახულება გვიჩვენებს, რომ არეკვლას ადგილი აქვს იმ შემთხვევაშიც კი, როდესაც ნივთიერება საერთოდ არ შთანთქავს სინათლეს – $R \approx 0$, როცა $k = 0$.

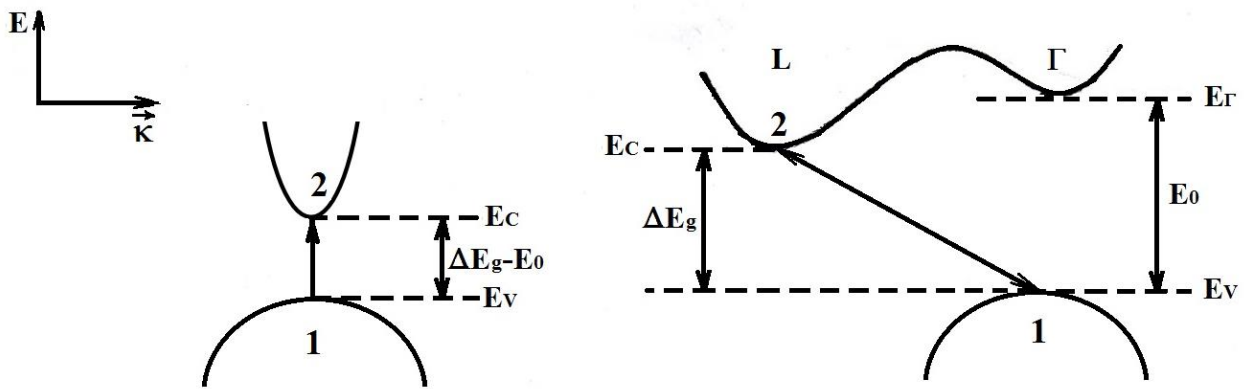
მყარი სხეულების ოპტიკური თვისებების შესწავლისას ყოველთვის არ ხერხდება ყველა პროცესის თანასწორუფლებიანი კვლევა; ზოგიერთ კრისტალს ახასიათებს იმდენად ძლიერი შთანთქმა, რომ გამჭვირვალობის დადგენა შეუძლებელი ხდება – იზომება მხოლოდ არეკვლა. ამავე დროს, ნახევრად გამტარის ზონური სტრუქტურის შესწავლის თვალსაზრისით, გაცილებით მეტი მნიშვნელობა ენიჭება შთანთქმის მოვლენას, მისი პარამეტრების ცოდნას, ვიდრე არეკვლას. ამის გამო, საჭირო ხდება არეკვლის სპექტრის საშუალებით გაეთვალით შთანთქმის სპექტრი, რის საშუალებასაც იძლევა კრამერს-კრონიგის დისპერსიული თანაფარდობები, რომლებიც ერთმანეთთან აკავშირებს კომპლექსური ოპტიკური პარამეტრების ნამდვილ და წარმოსახვით ნაწილებს

$$\varepsilon_1(\omega_0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega \varepsilon_2(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad \text{ან} \quad n(\omega_0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega k(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (6.10)$$

$$\varepsilon_2(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} \quad \text{ან} \quad k(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} \int_0^\infty \frac{n(\omega) d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}. \quad (6.11)$$

ამ გამოსახულებებში განიხილება ინტეგრალის მთავარი მნიშვნელობა $0 < \omega < \infty$ შუალედში.

ნახევრად გამტარში გარკვეული ენერგიის სინათლის კვანტის შთანთქმა, ძირითადად, დაკავშირებულია ელექტრონის ენერგეტიკული მდგომარეობის ცვლილებასთან, რომელიც მიმდინარეობს ენერგიისა და იმპულსის შენახვის კანონების დაცვით. განვიხილოთ შთანთქმის პროცესი, რომლის დროსაც ელექტრონი ასრულებს ზონათაშორისო გადასვლას სავალენტო ზონიდან გამტარობის ზონაში. ვთქვათ, ზონები სფერული სიმეტრიისა და მარტივი აგებულებისაა. საწყის მდგომარეობაში ელექტრონის ენერგია და ტალღური ვექტორი იყოს E_1 და \vec{k}_1 , საბოლოოში – E_2 და \vec{k}_2 (ნახ. 6.1)



ნახ. 6.1. \vec{k} - სივრცეში ელექტრონული გადასვლები ოპტიკური შთანთქმისას
 ა) პირდაპირი გადასვლები; ბ) არაპირდაპირი გადასვლები

ენერჯიის შენახვის კანონის თანახმად, ენერგეტიკული ინტერვალი ელექტრონის საბოლოო და საწყის მდგომარეობებს შორის შთანთქმული კვანტის ენერჯიით განისაზღვრება, ხოლო პროცესში ორი ნაწილაკის - ელექტრონის და ფოტონის მონაწილეობა ნიშნავს, რომ ელექტრონის კვაზიიმპულსის ცვლილება მხოლოდ ფოტონის იმპულსით შეიძლება იყოს განპირობებული

$$E_2 - E_1 = E_0 = \hbar\omega. \quad (6.12)$$

$$P_2 - P_1 = \hbar(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) = \hbar\vec{\eta}. \quad (6.13)$$

სიმცირის გამო ფოტონის იმპულსი შეიძლება უგულებელვყოთ $\vec{\eta} \approx 0$ ე.ი.

$$\vec{k}_2 = \vec{k}_1. \quad (6.14)$$

ფოტონის შთანთქმისას ელექტრონის გადასვლა E_0 ღრეზოს გადალახვით შესაძლებელია მხოლოდ ტალღური ვექტორის შეუცვლელად (ელექტრონის საბოლოო და საწყისი მდგომარეობა ბრიუენის ზონის ერთსა და იმავე წერტილში უნდა მდებარეობდეს), მათ პირდაპირ გადასვლებს უწოდებენ. ამავე დროს, მრავალ რეალურ ნახევრად გამტარში (თავი II) სავალენტო და გამტარობის ზონის აბსოლუტური ექსტრემუმები ბრიუენის ზონის სხვადასხვა წერტილებშია განლაგებული (ნახ. 6.1. ბ) და ამ ნახევრად გამტარში ექსპერიმენტულად შეიმჩნევა ისეთი ფოტონის შთანთქმა, რომლის ენერჯია უახლოვდება აკრძალული ზონის სიგანეს და გაცილებით მცირეა პირდაპირი გადასვლის E_0 ენერჯიაზე. მაშასადამე, შთანთქმული ფოტონის ენერჯიის ხარჯზე ელექტრონი ასრულებს ზონათაშორისო გადასვლას ტალღური ვექტორის ცვლილებით (არაპირდაპირი გადასვლა). იმპულსის მუდმივობის კანონის შესასრულებლად შთანთქმის პროცესში მესამე ნაწილაკის მონაწილეობა ხდება აუცილებელი. ამ ნაწილაკად $\hbar\omega_q$ ენერჯიისა და $\hbar q$ იმპულსის მქონე ფონონი გვევლინება. ამრიგად,

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega \pm \hbar\omega_q \quad (6.15)$$

და

$$\vec{P}_2 - \vec{P}_1 = \hbar \vec{q}, \quad (6.16)$$

ანუ

$$\vec{k}_2 = \vec{k}_1 + \vec{q}. \quad (6.17)$$

„±“ ნიშანი (6.15)-ში ითვალისწინებს პროცესის მიმდინარეობის შესაძლებლობას, როგორც ფონონის შთანთქმით, ასევე გამოსხივებით.

6.2. ოსცილატორის ძალა.

კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივე

იმისათვის, რომ კრისტალში მიმდინარე შთანთქმის პროცესების მიხედვით ვიმსჯელოთ ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის მახასიათებელ პარამეტრებზე, განსაზღვრული უნდა იყოს ის კავშირი, რომელიც არსებობს შთანთქმის სპექტრსა და ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის თავისებურებებს შორის.

შთანთქმის კოეფიციენტი (რომელიც, როგორც აღნიშნული იყო, განსაზღვრავს ფოტონის შთანთქმის ალბათობას) ელექტრონის ზონათაშორისო გადასვლებით განპირობებული შთანთქმისას დაკავშირებულია ამ გადასვლების ალბათობასთან, სავალენტო ზონაში დაკავებულ და გამტარობის ზონაში თავისუფალ მდგომარეობათა რიცხვთან. ამ ფაქტორების გათვალისწინებით გადასვლების კვანტურ თეორიაში შთანთქმის კოეფიციენტისათვის მიღებულია შემდეგი გამოსახულება:

$$\alpha(\hbar\omega) = B f_{12} \rho_r(E). \quad (6.18)$$

სადაც B არის მუდმივა; f_{12} - საწყისი მდგომარეობიდან საბოლოო მდგომარეობაში ელექტრონის გადასვლის ოსცილატორის ძალა; $\rho_r(E)$ - კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივე. ზოგადად

$$f_{12} = \frac{2|\langle \vec{k}_2 | \vec{P} | \vec{k}_1 \rangle|}{m_0(E_2 - E_1)} \quad (6.19)$$

ოსცილატორის ძალის მრიცხველში წარმოდგენილია კვაზიიმპულსის $|\vec{P}|$ ოპერატორის მატრიცული ელემენტის მოდულუს კვადრატი ელექტრონის საწყისი მდგომარეობიდან საბოლოო მდგომარეობაში გადასვლისას: m_0 - ელექტრონის მასა, E_2 და E_1 - საბოლოო და საწყის მდგომარეობების ენერგიები.

ოსცილატორის ძალა f_{12} პროპორციულია საწყისი მდგომარეობიდან საბოლოო მდგომარეობაში ელექტრონის გადასვლის ალბათობისა და განსაზღვრავს

მოცემული გადასვლის წვლილს შთანთქმაში. თუ $f_{12} = 0$, მაშინ გადასვლას, კვანტური შერჩევის წესის თანახმად, აკრძალული ეწოდება, ხოლო თუ $f_{12} \neq 0$, – დაშვებული. იზოლირებულ ატომში ელექტრონების გადასვლისათვის არსებობს შერჩევის მეტად მარტივი წესი: ელექტრონის საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ორბიტალური მომენტის ცვლილება ერთის ტოლი უნდა იყოს ($\Delta l = \pm 1$), მაგრამ იზოლირებულ ატომში არსებული ეს შერჩევის წესი კრისტალის შემთხვევაში მკაცრად არ სრულდება. ამის მიზეზი – კრისტალის შემადგენელ ნაწილაკებს შორის არსებული რთული ურთიერთქმედებაა, რომელიც განაპირობებს შერჩევის წესის თანახმად აკრძალული გადასვლების განხორციელებასაც. თუმცა, ეს გადასვლები სუსტია და მათი ალბათობა დაშვებული გადასვლების ალბათობასთან შედარებით – მცირე.

იმისათვის, რომ შევისწავლოთ შთანთქმის კოეფიციენტის სიხშირული დამოკიდებულება $\alpha(\omega)$, საჭიროა ვიცოდეთ ოსცილატორის ძალის ენერჯიაზე დამოკიდებულება. გადასვლის \vec{P}_0 წერტილის მახლობლობაში გადასვლის ალბათობის ფუნქცია დავშალოთ მწკრივად, მაშინ:

$$W(\vec{P}) = W(\vec{P}_0) + \left. \frac{dW}{d\vec{P}} \right|_{\vec{P}=\vec{P}_0} (\vec{P} - \vec{P}_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2W}{d\vec{P}^2} \right|_{\vec{P}=\vec{P}_0} (\vec{P} - \vec{P}_0)^2 + \dots \quad (6.20)$$

თუ ენერგეტიკული ზონები, რომელთა შორისაც ხდება ელექტრონების გადასვლა, შექმნილია ისეთი ატომური მდგომარეობებით, რომელთათვისაც $\Delta l = \pm 1$, მაშინ გადასვლა დაშვებულია, $W(\vec{P}_0) \neq 0$ და შეიძლება შემოვიფარგლოთ ნულოვანი მიახლოებით \vec{P}_0 წერტილის მახლობლობაში. აქედან გამომდინარე, $W(\vec{P}) = W(\vec{P}_0) = const$ და ე.ი. W -ს პროპორციული ოსცილატორის ძალაც f_{12} მუდმივი, ენერჯიისაგან დამოუკიდებელი სიდიდე იქნება, დაშვებული გადასვლებისათვის – $f_{12} = const$.

აკრძალული გადასვლებისათვის გადასვლის ალბათობა \vec{P}_0 წერტილში ნულის ტოლი უნდა იყოს: $W(\vec{P}_0) = 0$ და $W(\vec{P})$ შეფასებისათვის უნდა ავიღოთ გაშლის შემდეგი წევრი:

$$W(\vec{P}) = \left. \frac{dW}{d\vec{P}} \right|_{\vec{P}=\vec{P}_0} (\vec{P} - \vec{P}_0) \quad (2.21)$$

და თუ გავითვალისწინებთ ოსცილატორის ძალის კვაზიიმპულსზე კვადრატულ დამოკიდებულებას (6.19), აკრძალული გადასვლებისათვის შესრულდება პირობა $W(\vec{P}) \sim (\vec{P} - \vec{P}_0)^2$, ე.ი. აკრძალული გადასვლებისათვის \vec{P}_0 წერტილში ოსცილატორის

ძალა ემორჩილება შემდეგ თანაფარდობას: $f_{12} \sim (\vec{P} - \vec{P}_0)^2$ და აქედან გამომდინარე, ისეთი ზონებისათვის, რომლებიც ხასიათდებიან დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონით, ოსცილატორის ძალა ენერგიაზე პროპორციულად იქნება დამოკიდებული.

თუ გავითვალისწინებთ ზემოთ მიღებულ შედეგებს, შეიძლება ჩამოვაცალიბოთ შემდეგი წესი: დაშვებული გადასვლებისათვის ოსცილატორის ძალა ენერგიაზე (სისწირეზე) დამოკიდებული არ არის, ხოლო აკრძალული გადასვლებისათვის ოსცილატორის ძალა ენერგიის პროპორციულია.

განვიხილოთ თუ რა თავისებურებები ახასიათებს კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივეს. ელექტრონული გადასვლების კვანტურ თეორიაში კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივისათვის არსებობს შემდეგი გამოსახულება:

$$\rho_r(\hbar\omega)dE = \frac{2}{h^3} \int \delta(E_0 - \hbar\omega) d\vec{P}. \quad (6.22)$$

δ ფუნქციის გამოყენების ფიზიკური არსი იმაში მდგომარეობს, რომ კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივეს მხოლოდ იმ შემთხვევაში შეიძლება გააჩნდეს ნულისაგან განსხვავებული მნიშვნელობა, თუ სრულდება ენერგიის მუდმივობის კანონი, ანუ გადასვლის ენერგია E_0 და კვანტის ენერგია ერთმანეთის ტოლია

$$\delta = \begin{cases} \infty & \text{თუ } \hbar\omega = E_0 \\ 0 & \text{თუ } \hbar\omega \neq E_0 \end{cases}, \quad \text{თანაც } \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\hbar\omega - E_0) d(\hbar\omega) \quad (6.23)$$

იმ შემთხვევაში, თუ (6.17) გამოსახულებაში შემავალ ინტეგრალს განვიხილავთ კვაზიიმპულსის მხოლოდ ისეთ სიმრავლეზე, სადაც სრულდება ენერგიის მუდმივობის კანონი, მივიღებთ

$$\rho_r(E)dE = \frac{2}{h^3} \int_G d\vec{P}. \quad (6.24)$$

სფერული ზონებისათვის ასეთ მნიშვნელობათა სიმრავლე მოთავსდება E და $E+dE$ ენერგიების ორ სფერულ იზოენერგეტიკულ ზედაპირს შორის და ენერგიის ნაზარდს ექნება სახე

$$dE = |\nabla_p E_0| d\vec{P}_n, \quad (6.25)$$

სადაც $d\vec{P}_n$ არის \vec{P} -ს ნაზრდი იზოენერგეტიკული ზედაპირის ნორმალის გასწვრივ. თუ იზოენერგეტიკული ზედაპირის ელემენტს აღვნიშნავთ dS -ით მაშინ (6.25) გამოსახულების გათვალისწინებით მივიღებთ

$$d\vec{P} = dS d\vec{P}_n = \frac{dS dE}{|\nabla_p E_0|}, \quad (6.26)$$

(6.24) გამოსახულებაში მოცულობითი ინტეგრალიდან ზედაპირულ ინტეგრალზე გადასვლა მოგვცემს

$$\rho_r(E) = \frac{2}{h^3} \int_{S_{E_0=\hbar\omega}} \frac{dS}{|\nabla_p E_0|} = \frac{2}{h^3} \int_{S_{E_0=\hbar\omega}} \frac{dS}{\nabla_p E_2 - \nabla_p E_1}, \quad (6.27)$$

სადაც ინტეგრალი აღებულია $E_0 = \hbar\omega$ იზოენერგეტიკულ ზედაპირზე.

კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულება მოგვცემს განსაკუთრებულ მნიშვნელობებს ბრილუენის ზონის მხოლოდ ისეთ წერტილებში, სადაც ინტეგრალქვეშა ფუნქციის მნიშვნელი ნულის ტოლი ხდება. ასეთ წერტილებს ბრილუენის ზონის კრიტიკული წერტილები, ანუ ვან-ჰოვის განსაკუთრებული წერტილები ეწოდებათ. არსებობს პირველი ან მეორე გვარის განსაკუთრებული წერტილები. ბრილუენის ზონის წერტილებს, რომლებშიც სრულდება პირობა $\nabla_p E_2 - \nabla_p E_1 = 0$ ეწოდებათ პირველი გვარის კრიტიკული წერტილები, ხოლო, თუ სრულდება პირობა $\nabla_p E_0 = 0$, მაგრამ $\nabla_p E_2 - \nabla_p E_1 \neq 0$ – მეორე გვარის კრიტიკული წერტილები.

აღმოჩნდა, რომ კრიტიკული წერტილები გვხვდება მხოლოდ ბრილუენის ზონის მაღალი სიმეტრიის წერტილებში. იმისდა მიხედვით, თუ როგორია გადასვლის ენერგიის ტალღური ვექტორის კომპონენტებზე $E_0(k_x, k_y, k_z)$ დამოკიდებულება, ორივე გვარის კრიტიკული წერტილები, თავის მხრივ, იყოფა კიდევ ოთხი სახის კრიტიკულ წერტილებად (ცხრილი 6.2).

ცხრილი 6.2

კრიტიკული წერტილების კლასიფიკაცია

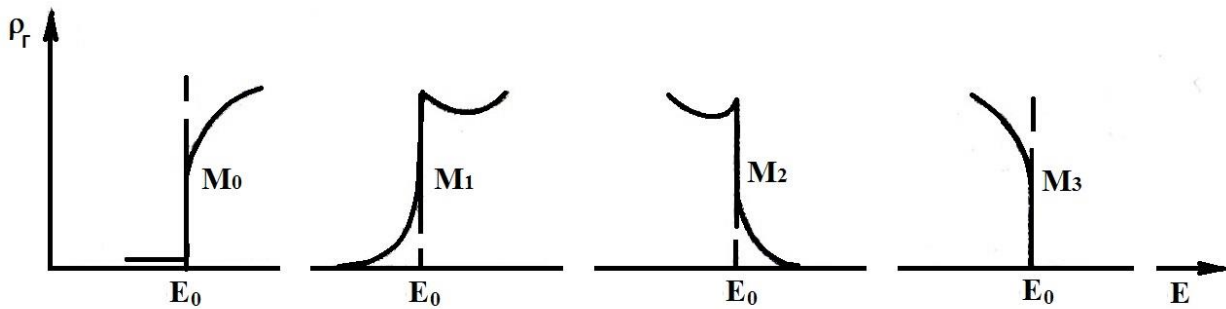
კრიტიკული წერტილის აღნიშვნა	$E_0(k_x)$	$E_0(k_y)$	$E_0(k_z)$	
M_0				ენერგიის მინიმუმი
M_1				ენერგიის უნაგირა წერტილი
M_2				ენერგიის უნაგირა წერტილი
M_3				ენერგიის მაქსიმუმი

დადგენილ იქნა აგრეთვე კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულების სახე პირდაპირი დაშვებული გადასვლებისათვის (ცხრილი 6.3 და ნახ. 6.2).

კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულების სახე

	კრიტიკული წერტილის სახე			
	M_0	M_1	M_2	M_3
$\hbar\omega < E_0$	0	$[c - (E_0 - \hbar\omega)]^{1/2}$	c	$(E_0 - \hbar\omega)^{1/2}$
$\hbar\omega > E_0$	$(E_0 - \hbar\omega)^{1/2}$	c	$[c - (E_0 - \hbar\omega)]^{1/2}$	0

c – ენერგიაზე ძალიან სუსტად დამოკიდებული კვაზიმუდმივი ფუნქციაა.



ნახ. 6.2 კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულების სახე კრიტიკული წერტილების მახლობლობაში

ნახევრად გამტარული კრისტალის მიერ სინათლის შთანთქმა ხუთი სხვადასხვა მექანიზმით შეიძლება იყოს გამოწვეული: 1. საკუთარი; 2. ექსიტონური; 3. მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე; 4. მინარეული (შთანთქმის ეს ოთხივე სახე ელექტრონული ბუნებისაა) და 5. მესრის სითბურ რხევებზე შთანთქმა.

საკუთარი, ანუ ფუნდამენტური შთანთქმა – შთანთქმული ფოტონის ენერჯის ხარჯზე ელექტრონი გადადის სავალენტო ზონიდან გამტარობის ზონაში. შთანთქმის ამ მექანიზმის შესწავლით საშუალება გვაქვს დავადგინოთ სავალენტო და გამტარობის ზონებს შორის ენერგეტიკულ ღრეხოთა სიდიდე.

ექსიტონური შთანთქმა – შთანთქმული ფოტონის ენერგია იხარჯება კრისტალში ექსიტონის ფორმირებაზე, ანუ ელექტრონი სავალენტო ზონიდან გადადის აკრძალულ ზონაში, გამტარობის ზონის მახლობლად განლაგებულ ექსიტონურ დონეზე. ეს შთანთქმა საშუალებას გვაძლევს ვიმსჯელოთ ექსიტონის ბმის ენერგიაზე, მის ლოკალიზაციაზე ბრილუენის ზონაში.

შთანთქმა მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე – შთანთქმული ფოტონის ენერგია უზრუნველყოფს მუხტის თავისუფალი გადამტანის გადასვლას ერთი ქვეზონის ფარგლებში დაბალი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში ან ქვეზონებს შორის გადასვლას ერთი ზონის ფარგლებში.

აღნიშნული შთანთქმის შესწავლა საშუალებას გვაძლევს ვიმსჯელოთ ცალკეული ზონის აგებულებაზე.

მინარეული შთანთქმა – ამ შემთხვევაში ადგილი აქვს ელექტრონულ გადასვლებს ან მინარეული მდგომარეობისა და დაშვებული ზონის მონაწილეობით, ან მინარეული მდგომარეობის ფარგლებში. ამ მექანიზმის საშუალებით შეიძლება დავადგინოთ მინარევის იონიზაციის ენერგია, მინარევის ძირითად და აღზნებულ მდგომარეობებს შორის ენერგეტიკული ღრეჩო.

შთანთქმა მესრის სითბურ რხევებზე – შთანთქმული ფოტონის ენერგია მიდის მესრის შემადგენელი ატომების სითბური რხევების ენერგიის ცვლილებაზე. შთანთქმის ამ მექანიზმის შესწავლა საშუალებას გვაძლევს გავერკვეთ მოცემული კრისტალისათვის დამახასიათებელი ფონონების სიხშირესა და სტრუქტურაში (როგორცა ფონონის ტიპი, სად არის ლოკალიზებული და ა.შ.).

6.3. საკუთარი და ექსიტონური შთანთქმა

განვიხილოთ კავშირი შთანთქმის სპექტრსა და ენერგეტიკული ღრეჩოების სიდიდეებს შორის საკუთარი შთანთქმისას და ვნახოთ, თუ როგორ შეიძლება ამ მონაცემების მიხედვით დავადგინოთ აკრძალული ზონის სიგანე.

თავდაპირველად ავიღოთ ნახევრად გამტარი, რომლის სავალენტო და გამტარობის ზონების აბსოლუტური ექსტრემუმები ბრილუენის ზონის ერთ წერტილში არიან განლაგებული (პირდაპირ-ზონიანი ნახევრად გამტარი) და ორივე ზონა სფერული სიმეტრიისაა – დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონების

$$\left(E_2 = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}, E_1 = E_V \mp \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \right) \text{ შესაბამისად. ვინაიდან ასეთი ზონებისათვის } m_n^* \text{ და } m_p^* \text{ სკალარულ სიდიდეებს წარმოადგენენ და მათი ყველა კომპონენტი დადებითია, } E(\vec{k}_0) \text{ ფუნქციის ექსტრემალური მნიშვნელობა გადასვლის ენერგიის (ამ შემთხვევაში } \Delta E_g) \text{ ტოლია და ექსტრემუმი } M_0 \text{ ტიპის კრიტიკულ წერტილს წარმოადგენს. ჩავთვალოთ, რომ სავალენტო ზონა შექმნილია } P \text{ ატომური მდგომარეობით, ხოლო გამტარობის } - S \text{ მდგომარეობებით, მაშინ } \Delta l = -1 \text{ - გადასვლა დაშვებულია და ოსცილატორის ძალა ენერგიაზე დამოუკიდებელ, მუდმივ სიდიდეს წარმოადგენს (6.2). კომბინირებულ მდგომარეობათა სიდიდის კონკრეტული სახის}$$

გათვალისწინებით (ცხრილი 6.3, ნახ. 6.2) შთანთქმის კოეფიციენტისათვის მივიღებთ (თანაც $\alpha = 0$ თუ $\hbar\omega < \Delta E_g$).

$$\alpha(\hbar\omega) = Bf_{12}\rho_r(E) = C_d(\hbar\omega - \Delta E_g)^{1/2}. \quad (6.28)$$

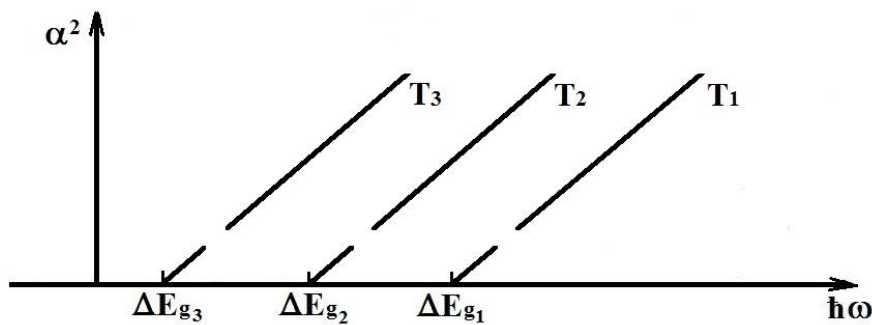
ენერგიის მუდმივობის კანონი საშუალებას გვაძლევს ჩავწეროთ გამოსახულება იმ კვანტის ენერგიისათვის, რომლის შთანთქმაც შეიძლება განხორციელდეს სფერულ ზონებს შორის ელექტრონების გადასვლისას,

$$\begin{aligned} \hbar\omega = E_2 - E_1 &= \left(E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \right) - \left(E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \right) = \\ &= \Delta E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_n^*} + \frac{1}{m_p^*} \right) = \Delta E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r^*}, \end{aligned} \quad (6.29)$$

სადაც m_r^* დაყვანილი ეფექტური მასაა.

(6.28) ფორმულა საშუალებას იძლევა მარტივად და საკმაოდ მაღალი სიზუსტით გამოვთვალოთ აკრძალული ზონის სიგანე. ამისათვის, ექსპერიმენტულად, კვანტის სხვადასხვა ენერგიაზე განსაზღვრულ უნდა იქნას შთანთქმის კოეფიციენტის სიდიდე და შემდეგ მონაცემები გაანალიზდეს α^2 და $\hbar\omega$ კოორდინატთა სისტემაში. თუ შთანთქმა ნამდვილად განხილულ მექანიზმს შეესაბამება, მაშინ ექსპერიმენტული მონაცემები განლაგდება წრფეზე, რომლის გადაკვეთაც ენერგიის ღერძთან მოგვცემს აკრძალული ზონის სიგანეს.

ნახ. 6.3-ზე წარმოდგენილია შთანთქმის სპექტრი სამი სხვადასხვა ტემპერატურისათვის, როგორც ვხედავთ, ადგილი აქვს აკრძალული ზონის სიგანის შემცირებას ტემპერატურის ზრდასთან ერთად.



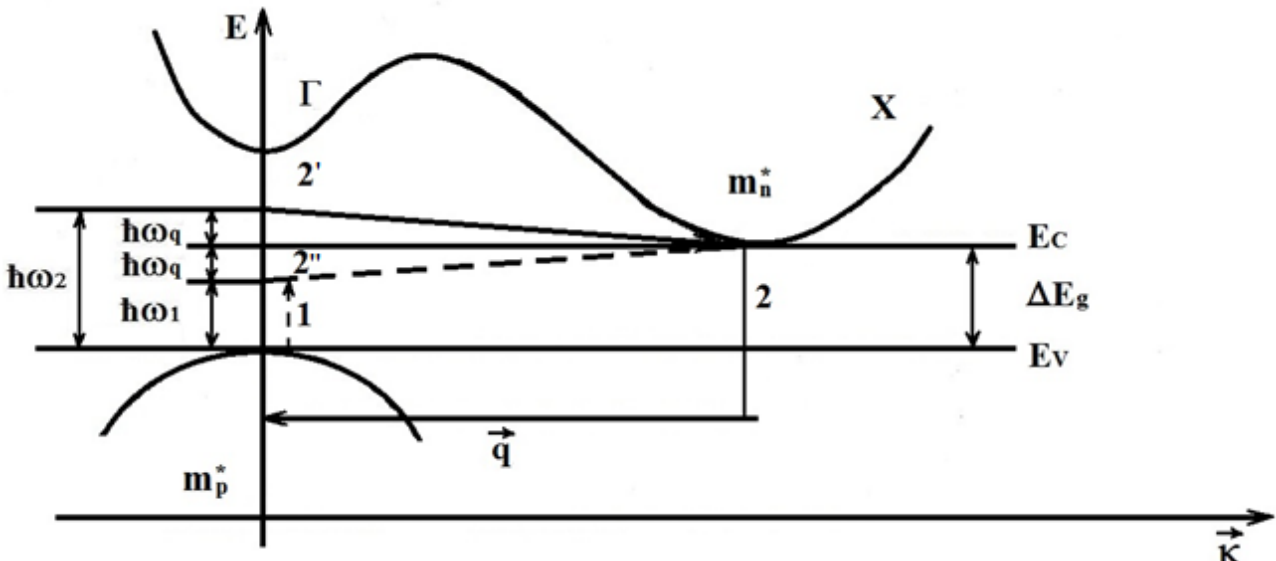
ნახ. 6.3. აკრძალული ზონის სიგანის განსაზღვრა საკუთარი შთანთქმის კიდის მიხედვით პირდაპირი გადასვლებისას ($T_3 > T_2 > T_1$)

თუ სავალენტო და გამტარობის ზონები შექმნილია ისეთი ატომური მდგომარეობებით, რომ გადასვლა აკრძალულია ($\Delta l \neq \pm 1$), მაშინ ოსცილატორის ძალის ენერგიაზე დამოკიდებულების გამო, ერთი ერთეულით მოიმატებს ხარისხის მაჩვენებლის სიდიდე შთანთქმის კოეფიციენტის გამოსახულებაში

$$\alpha(\hbar\omega) = C_{af} (\hbar\omega - \Delta E_g)^{3/2}. \quad (6.30)$$

განვიხილოთ ნახევრად გამტარი, რომელშიც დაშვებული ზონების აბსოლუტური ექსტრემუმები განლაგებულია ბრილუენის ზონის სხვადასხვა წერტილში (ნახ. 6.4).

როგორც 6.1-ში იყო აღნიშნული, ელექტრონის არაპირდაპირი ზონათშორისო გადასვლისას შთანთქმის პროცესში აუცილებელია სამი ნაწილაკის – ელექტრონის, ფოტონისა და ფონონის მონაწილეობა. ელექტრონის არაპირდაპირი გადასვლა შეიძლება ორ საფეხურად წარმოვადგინოთ: ელექტრონი შთანთქავს ფოტონს და გადადის ვირტუალურ მდგომარეობაში (ეს გადასვლა პირდაპირია და ამიტომ ფონონის მონაწილეობას არ მოითხოვს), შემდგომ ელექტრონი ან შთანთქავს, ან ასხივებს ფონონს და გადადის საბოლოო მდგომარეობაში. თუ გადასვლა ხდება $1 \rightarrow 2' \rightarrow 2$ სქემით – ელექტრონი ფონონს ასხივებს, ანუ ფონონის შესაბამის ენერგიას გადასცემს კრისტალურ მესერს, ხოლო თუ გადასვლა მიდის $1 \rightarrow 2'' \rightarrow 2$ სქემით, მაშინ იგი ენერგიას ართმევს კრისტალურ მესერს – ელექტრონი შთანთქავს ფონონს.



ნახ. 6.4. სინათლის შთანთქმის პროცესი არაპირდაპირი გადასვლებისას

არაპირდაპირი გადასვლისას კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივე ენერგიის კვადრატის პროპორციულია

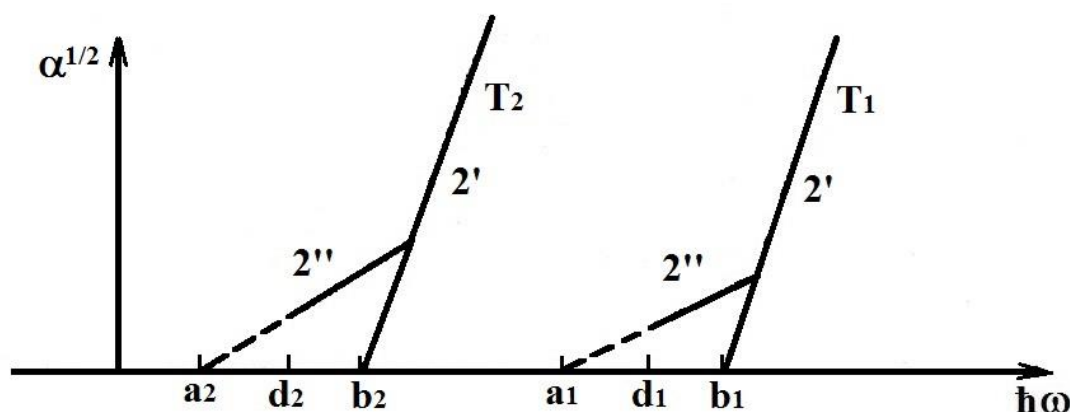
$$\rho_r(\hbar\omega) \sim (\hbar\omega - \Delta E_g \pm \hbar\omega_q)^2. \quad (6.31)$$

დაშვებული გადასვლებისას ოსცილატორის ძალა მუდმივია და შთანთქმის კოეფიციენტის გამოსახულება შემდეგ სახეს მიიღებს:

$$\alpha(\hbar\omega) = C_{11} \frac{(\hbar\omega - \Delta E_g \pm \hbar\omega_q)^2}{\exp(\hbar\omega_q/k_0T)^{\pm 1}} + C_{12} \frac{(\hbar\omega - \Delta E_g \pm \hbar\omega_q)^2}{1 - \exp(\hbar\omega_q/k_0T)}. \quad (6.32)$$

ექსპონენციალური წვერი ითვალისწინებს ფონონების საშუალო რიცხვის კრისტალის ტემპერატურაზე დამოკიდებულებას, აკრძალული გადასვლების შემთხვევაში ხარისხის მახვენებელი ორივე შესაკრების მრიცხველში სამის ტოლი გახდება.

შთანთქმის სპექტრის გრაფიკული ანალიზი საშუალებას გვაძლევს დავადგინოთ აკრძალული ზონის სიგანე და ვიმსჯელოთ იმ ფონონის ენერგიაზე, რომელთანაც ურთიერქმედებს ელექტრონი (ნახ. 6.5).



ნახ. 6.5. აკრძალული ზონის სიგანისა და შთანთქმის პროცესში მონაწილე ფონონების ენერგიის განსაზღვრა საკუთარი შთანთქმის კოდის მიხედვით არაპირდაპირი გადასვლებისას ($T_2 > T_1$)

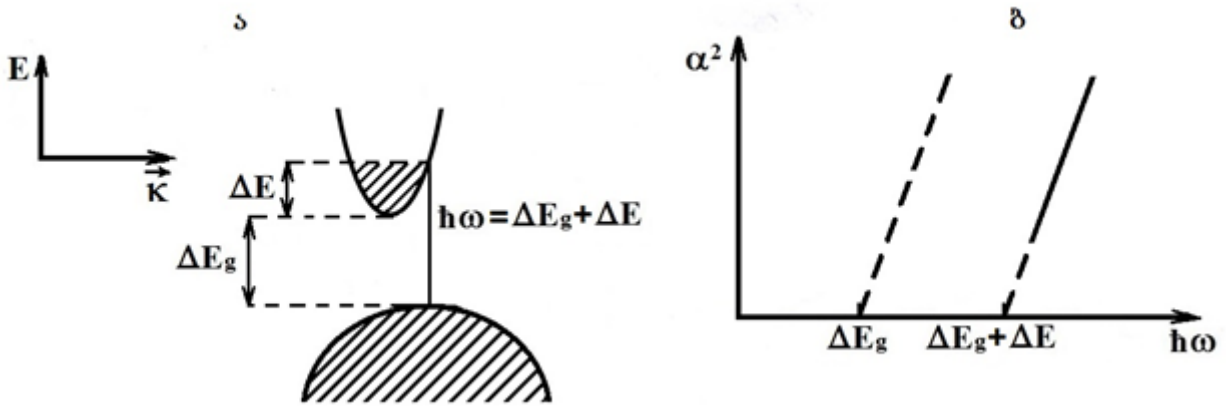
შთანთქმის სპექტრი $\alpha^{1/2} - \hbar\omega$ კოორდინატთა სისტემაში წარმოადგენს ორი წრფივი დამოკიდებულების ჯამს, რომელთა ექსტრაპოლაცია ნულოვან მნიშვნელობამდე გვაძლევს ენერგიის ორ სიდიდეს $a = \Delta E_g - \hbar\omega_q$, $b = \Delta E_g + \hbar\omega_q$, ხოლო მათ შუაში განლაგებული წერტილი აკრძალული ზონის სიგანეს განსაზღვრავს

$$d = \Delta E_g - \frac{b+a}{2}. \quad (6.33)$$

აღსანიშნავია, რომ ტემპერატურის შემცირებისას მცირდება ფონონის შთანთქმით მიმდინარე გადასვლების წვლილი, რადგან დებაის ტემპერატურაზე ($\Theta = \hbar\omega_q/k_0$) ნაკლები ტემპერატურისას ფონონების რიცხვი კრისტალში მცირეა. ამდენად, შთანთქმა ძირითადად უნდა მიმდინარეობდეს ისეთი გადასვლებით, რომელთაც შეესაბამება ფონონის გამოსხივება.

გადაგვარებულ ნახევრად გამტარებში შესაძლებელია შთანთქმის სპექტრის დამახინჯება (წანაცვლება ენერგიის მიხედვით). მიზეზი – გამტარობის ზონის

დაბალი მდგომარეობათა სიმკვრივე (მცირე ეფექტური მასა) და ელექტრონების მაღალი კონცენტრაციაა. გამტარობის ზონა ელექტრონებით მნიშვნელოვნად შევსებული აღმოჩნდება და სინათლის მხოლოდ ისეთი კვანტის შთანთქმა იქნება შესაძლებელი, რომელიც უზრუნველყოფს ელექტრონის გადასვლას სავალენტო ზონიდან გამტარობის ზონის მაღალ, თავისუფალ მდგომარეობებში. სპექტრში შთანთქმის კიდე ზონის ელექტრონებით შევსების ΔE ენერგიით (ნახ. 6.6.) აღმოჩნდება წანაცვლებული (ბერშტეინ-მოსის ეფექტი).



ნახ. 6.6. ბერშტეინ-მოსის წანაცვლება შთანთქმის სპექტრში
 ა) ზონურ დიაგრამაზე; ბ) შთანთქმის კიდის წანაცვლება

როგორც ვხედავთ, საკუთარი შთანთქმისას $\alpha(\hbar\omega)$ -ს გამოსახულებაში შთანთქმის კონკრეტული მექანიზმის მიხედვით ხარისხის მაჩვენებელს შეიძლება ჰქონდეს სხვადასხვა მნიშვნელობა და თუ ხარისხის მაჩვენებელი ცნობილია, მაშინ აკრძალული ზონის სიგანის დადგენა შთანთქმის სპექტრიდან დიდ სიძნელეს არ წარმოადგენს. ამავე დროს, ხშირად ექსპერიმენტული მონაცემების დამუშავებისას უცნობია ორივე პარამეტრი (ΔE_g და ხარისხის მაჩვენებელი n). ასეთ შემთხვევაში გამოიყენება შემდეგი მეთოდიკა: გაზომვის შედეგებს იხილავენ $\lg \alpha \sim \lg(\hbar\omega - \Delta E_g)$ კოორდინატთა სისტემაში და გადასვლის ენერგიას არჩევენ მანამ, ვიდრე ექსპერიმენტული მონაცემები ერთ წრფეზე არ განლაგდება. სწორედ ეს ენერგია შეესაბამება აკრძალული ზონის სიგანეს, ხოლო გრაფიკის დახრილობა განსაზღვრავს ხარისხის მაჩვენებელს $\alpha \sim \hbar\omega$ დამოკიდებულებაში და ამდენად, ელექტრონული ზონათშორისო გადასვლების ტიპს.

თუ სინათლის კვანტის ენერგია რამდენადმე ნაკლებია აკრძალული ზონის სიგანეზე, მაშინ, დაბალი ტემპერატურებისას, შთანთქმული ფოტონის ენერგიის ხარჯზე შესაძლებელია ექსიტონის წარმოქმნა. ამ დროს ელექტრონი სავალენტო ზონიდან გადადის ექსიტონურ დონეზე, რომელიც გამტარობის ზონის ფსკერის

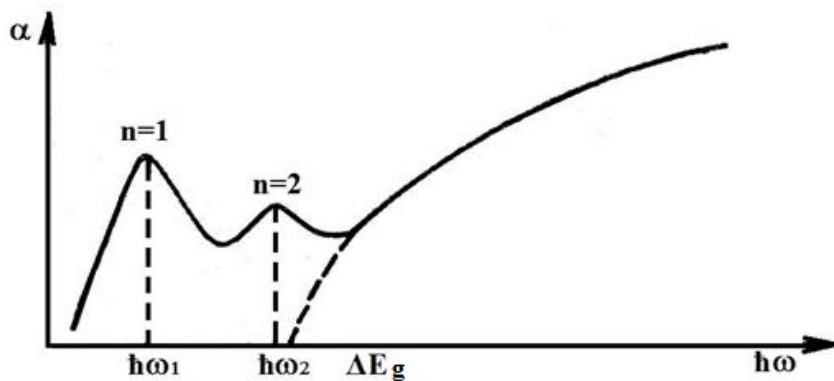
მახლობლად არის განლაგებული და რომლის ენერგია (E_c -დან ათვლილი) ექსიტონის ბმის ენერგიას გამოხატავს (6.28).

სპექტრში ექსიტონური შთანთქმა ვლინდება შთანთქმის კიდის მახლობლობაში ვიწრო მაქსიმუმის არსებობით, რომლის ინტენსივობა ტემპერატურაზეა დამოკიდებული. თუ ტემპერატურა არ არის დაბალი, მაშინ ელექტრონი გამოიყენებს სითბურ ენერგიას გამტარობის ზონაში გადასასვლელად და, ამდენად, შეუძლებელი გახდება ექსიტონური დონის გარჩევა, შთანთქმაში მისი წვლილის გამოვლინება. ძალიან დაბალი ტემპერატურის და მაღალი სპექტრალური გარჩევისუნარიანობის შემთხვევაში, შესაძლებელია ექსიტონური შთანთქმის მაქსიმუმის ნაზი სტრუქტურის გამოვლინება, რომელიც შთანთქმის პროცესში ექსიტონის აღზნებული მდგომარეობის მონაწილეობით არის განპირობებული. ნახ. 6.7-ზე ექსიტონის ძირითად ($n_1 = 1$) მდგომარეობასთან ერთად, პირველ აღზნებულ მდგომარეობაშიც ($n_2 = 2$) ელექტრონის გადასვლებით ფორმირებული ექსიტონური შთანთქმის სტრუქტურა არის წარმოდგენილი. ამ მაქსიმუმების ენერგეტიკული მდგომარეობის მიხედვით შესაძლებელი ხდება მაღალი სიზუსტით დავადგინოთ ექსიტონის ბმის ენერგია E_{ex} .

$$\hbar\omega_1 - \hbar\omega_2 = E_{ex}^{(1)} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = \frac{3}{4} E_{ex}^{(1)} \quad (6.34)$$

ექსიტონური შთანთქმა – პირდაპირზონიან ნახევრად გამტარში აღიწერება შემდეგი სპექტრალური კანონზომიერებით

$$\alpha(\hbar\omega) = C_{ex} \frac{1}{n^3} \left(\hbar\omega - \Delta E_g + E_{ex}^{(1)} \frac{1}{n^2} \right)^{1/2}. \quad (6.35)$$

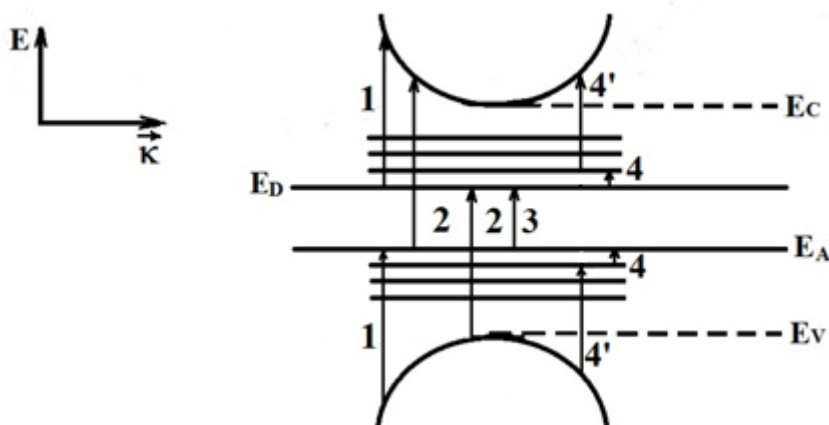


ნახ. 6.7. ექსიტონური შთანთქმის მაქსიმუმები ფუნდამენტური შთანთქმის კიდის მახლობლად

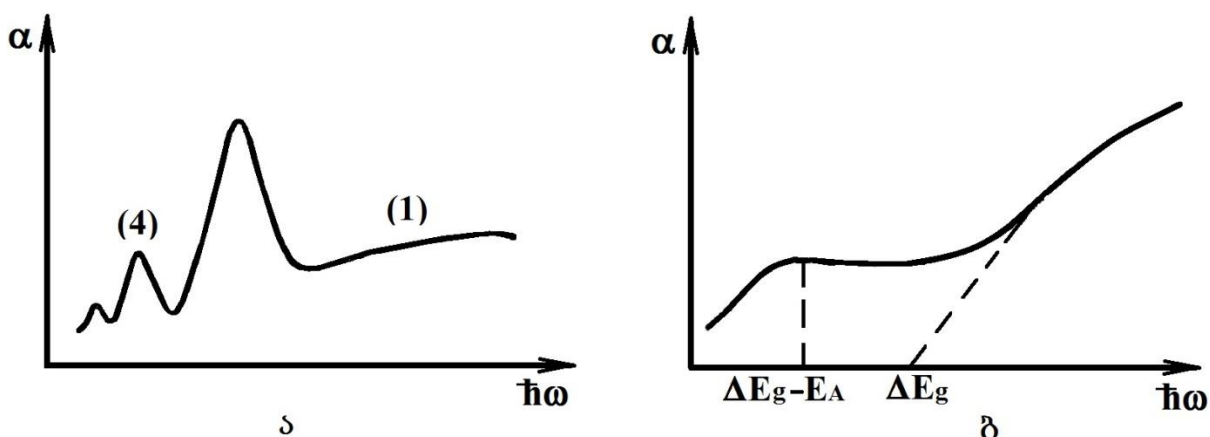
საკუთარი და ექსიტონური შთანთქმის მიხედვით შესაძლებელია, აგრეთვე, მუხტის გადამტანების ეფექტური მასის, რთული აგებულების ზონების ქვეზონებს შორის გახლეჩის ენერგიათა სიდიდეების შეფასება.

6.4. მინარეული შთანთქმა

იმ შემთხვევაში, როცა სინათლის კვანძის ენერგია ნაკლებია აკრძალული ზონის სიგანეზე, ნახევრად გამტარში მაინც ვლინდება შთანთქმა, რომელიც ხშირად მიმდინარეობს მინარეული მდგომარეობის მონაწილეობით. კრისტალში მინარევის საკმაოდ მაღალი კონცენტრაციისას შეიძლება გავარჩიოთ მინარეული შთანთქმის ოთხი სახე ნახ. 6.8. როგორც ნახაზიდან ჩანს, პირველი სახის მინარეულ შთანთქმაში მონაწილეობას ღებულობს მინარევის ძირითადი მდგომარეობა და უახლოესი დაშვებული ზონა; 2-მინარევის ძირითადი მდგომარეობა და ენერგეტიკულად შორს განლაგებული დაშვებული ზონა; 3-ორივე მინარევის ძირითადი მდგომარეობა; 4. და 4'-მინარევის აღვზნებული მდგომარეობები.



ნახ. 6.8. მინარეული შთანთქმის განხორციელების ენერგეტიკული სქემა



ნახ. 6.9. მინარეული შთანთქმის სპექტრების თავისებურებები:

- ა) მინარეული შთანთქმის 1 და 4 მექანიზმი;
- ბ) სავალენტო ზონა-დონორული დონე გადასვლებით განპირობებული სტრუქტურა შთანთქმის კიდის მახლობლად

1.4 და 4 – სახის მინარეული შთანთქმის განხორციელებისათვის საკმარისია სინათლის კვანტის ძალიან მცირე ენერგიები. ამიტომ იგი ვლინდება ოპტიკური სპექტრის ღრმა ინფრაწითელ არეში და, როგორც წესი, რამოდენიმე სტრუქტურას შეიცავს 6.9,ა ნახ-ზე. ამ სტრუქტურების გამოვლინება შესაძლებელია მხოლოდ ძალიან დაბალი ტემპერატურების დიაპაზონში. მეორე ტიპის მინარეული შთანთქმა ვლინდება შთანთქმის სპექტრში შთანთქმის ძირითადი კიდის მახლობლად, საკმაოდ გაშლილი სტრუქტურის სახით 6.9.ბ ნახ-ზე. შთანთქმის ეს პროცესი ($E_V - E_D$ - გადასვლები) შემდეგ სპექტრალურ კანონზომიერებას ემორჩილება

$$\alpha(\hbar\omega) = C_{12} \frac{x^{1/2}}{(1+x)^4} \quad (6.36)$$

სადაც

$$x = \frac{m_n^*}{m_p^*} = \frac{\hbar\omega - \Delta E_g + E_D}{E_D}. \quad (6.37)$$

შთანთქმის მესამე მექანიზმი დაკავშირებულია შთანთქმული ფოტონის ენერგიის ხარჯზე ელექტრონის აქცეპტორული დონიდან დონორულ დონეზე გადასვლასთან. როდესაც ნახევრად გამტარი ერთდროულად შეიცავს როგორც აქცეპტორულ, ასევე დონორულ მინარევსაც. ამგვარად, ძალიან დაბალი ტემპერატურების დროსაც კი, დონორული და აქცეპტორული ატომები ნაწილობრივ (ან მთლიანად) იონიზირებული არიან. შესაბამისი ენერგიის ფოტონების ზემოქმედებით ელექტრონები შეიძლება გადავიდეს იონიზირებულ დონორებზე და გადაიყვანოს ისინი (როგორც ერთი, ასევე მეორე) ნეიტრალურ მდგომარეობაში. შევსებული აქცეპტორული მდგომარეობიდან შეუვსებელ დონორულ მდგომარეობაში ელექტრონის გადასვლისათვის აუცილებელი ენერგია დამოკიდებულია არა მარტო დონორისა და აქცეპტორის იონიზაციის ენერგიაზე, არამედ მათ ურთიერთგანაწილებაზეც. ერთმანეთთან ასევე განლაგებული იონიზირებული დონორი და აქცეპტორი ქმნის ურთიერთსაპირისპიროდ დამუხტულ იონთა წყვილს: დადებითად დამუხტული დონორი და უარყოფითად დამუხტული აქცეპტორი. ასეთ წყვილში აუცილებლად წარმოიქმნება კულონური ურთიერთქმედება, რომელიც წაანაცვლებს ენერგეტიკულ მდგომარეობებს. ამდენად, იმ ფოტონის ენერგია, რომლის შთანთქმითაც ელექტრონი გადავა აქცეპტორიდან დონორზე ასე განისაზღვრება:

$$\hbar\omega = \Delta E_g - E_A - E_D + \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0 r}, \quad (6.38)$$

სადაც გამოსახულების ბოლო წევრი აღწერს იონიზირებულ დონორ-აქცეპტორული წყვილის კულონურ ურთიერთქმედებას.

6.5. შთანთქმა მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე და შიდაზონური შთანთქმა

აკრძალული ზონის სიგანესთან შედარებით მცირე ენერგიაზე, როგორც წესი, ვლინდება შთანთქმა, რომელიც ერთი დაშვებული ზონის ფარგლებში მუხტის გადამტანების ენერგიის ცვლილებასთან არის დაკავშირებული, ე.ი. შთანთქმული კვანტის ხარჯზე ელექტრონი გადადის დაბალი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში. შემდგომ საწყისში დაბრუნებისას ჭარბ ენერგიას გადასცემს კრისტალურ მესერს.

შთანთქმის ამ მექანიზმისათვის, ერთი ტიპის მუხტის გადამტანების შემცველი მარტივი ზონის შემთხვევაში, დიელექტრიკული შეღწევადობის ნამდვილ და წარმოსახვით ნაწილებს შემდეგი სახე აქვთ:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 - \omega_p^2 \left\langle \frac{\tau^2}{\omega^2 \tau^2 + 1} \right\rangle \right). \quad (6.39)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{\omega} \left\langle \frac{\tau}{\omega^2 \tau^2 + 1} \right\rangle, \quad (6.40)$$

აქ ε_∞ არის მაღალსიხშირული დიელექტრიკული შეღწევადობა, ანუ დიელექტრიკული შეღწევადობა შთანთქმის კიდეზე უფრო მაღალი სიხშირეების ($\omega > \omega_g$) არეში; ω_p – მუხტის თავისუფალი გადამტანების პლაზმური სიხშირე.

წარმოდგენილი თანაფარდობები მარტივდება, თუ $\omega^2 \tau^2 \gg 1$. ეს პირობა კი საკმაოდ კარგად სრულდება მუხტის გადამტანების მაღალი ძვრადობის მქონე ნახევრად გამტარებისათვის სიხშირეთა $\omega_1 < \omega < \omega_g$ დიაპაზონში (ω_1 მესრის გრძივი ოპტიკური რხევების შესაბამისი სიხშირეა). მაშინ

$$\varepsilon_1(\omega) \approx \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right). \quad (6.41)$$

$$\varepsilon_2(\omega) \approx \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{\omega^3 \langle \tau \rangle}. \quad (6.42)$$

(6.41) ფორმულიდან ჩანს, რომ $\omega = \omega_p$ სიხშირისათვის $\varepsilon_1(\omega)$ ფუნქცია ხასიათდება რეზონანსული თავისებურებებით, რომელსაც ლითონური არეკვლა შეესაბამება ($\varepsilon_1(\omega) \rightarrow 0, R \rightarrow 1$) და ω_p სიდიდეს პლაზმური რეზონანსის სიხშირე, ანუ პლაზმური სიხშირე ეწოდება.

სუსტი შთანთქმის შემთხვევაში ($n^2 \gg k^2$) და გარდატეხის მაჩვენებლის სიხშირეზე სუსტი დამოკიდებულებისას (დრუდე-ლორენცის მოდელი). გარდატეხის და შთანთქმის მაჩვენებლებისათვის გვექნება:

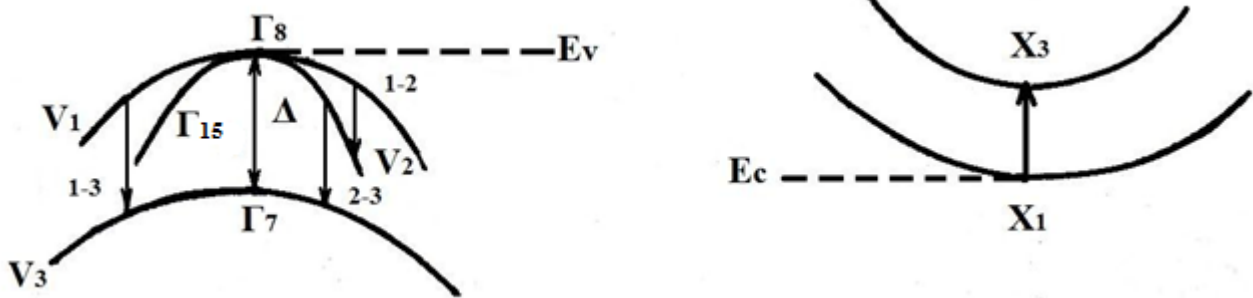
$$n^2 \approx \varepsilon_1(\omega) \approx \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right). \quad (6.43)$$

$$k \approx \frac{\varepsilon_2 \omega}{2n} = \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{2n \omega^3 \langle \tau \rangle}. \quad (6.44)$$

$$\alpha = \frac{2k\omega}{c} = \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{nc \omega^2 \langle \tau \rangle} = \frac{\varepsilon_\infty \omega_p^2}{4\pi^2 c^3 n \langle \tau \rangle} \cdot \lambda^2. \quad (6.45)$$

მაშასადამე, დრუდე-ლორენცის (კლასიკური) მოდელის შესაბამისად, მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე შთანთქმისას α იზრდება სინათლის λ ტალღის სიგრძის კვადრატის პროპორციულად. რეალურად, (6.45)-ში ტალღის სიგრძის ხარისხის მაჩვენებელი დამოკიდებულია კრისტალში მოქმედ კონკრეტულ გაბნევის მექანიზმზე. კვანტური მექანიკის მეთოდების გამოყენებით ნაჩვენებია იყო, რომ ხარისხის მაჩვენებელი $3/2$ ტოლია მუხტის გადამტანების აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას, $5/2$ – ოპტიკურ ფონონებზე და 3 -იონიზირებულ მინარევებზე გაბნევის შემთხვევაში.

იმ შემთხვევაში, როდესაც რთული აგებულებისაა სავალენტო ზონის აბსოლუტური მაქსიმუმი ნახ. 6.10(ა) ან გამტარობის ზონა აბსოლუტური მინიმუმის მახლობლობაში ნახ. 6.10(ბ), მუხტის თავისუფალი გადამტანების წვლილი შთანთქმაში შეიძლება გამოვლინდეს შიდაზონური გადასვლების სახით – შთანთქმული ფოტონის ენერჯიის ხარჯზე ადგილი აქვს ან ხერელების გადასვლას სავალენტო ზონის ქვეზონებს შორის, ან ელექტრონების გადასვლას გამტარობის ზონის ქვეზონებს შორის.



ნახ. 6.10. სავალენტო (ა) და გამტარობის (ბ) ზონებში ფოტონების შთანთქმით გამოწვეული შიდაზონური გადასვლები

ელექტრონების შიდაზონური გადასვლები კარგად ვლინდება, მაგალითად, გალიუმის ფოსფიდში, რომლის გამტარობის ზონის აბსოლუტური მინიმუმი ბრილუენის ზონის კიდეზე X წერტილშია განლაგებული. მის ზემოთ კი, $\delta_{1,3} = 0,32$ ევ-ის დაშორებით არსებობს გამტარობის ზონის კიდევ ერთი ქვეზონა X_3 , რის

გამოც, სინათლის შთანთქმისას ადგილი შეიძლება ჰქონდეს $X_1 \rightarrow X_3$ პირდაპირ ელექტრონულ გადასვლებს

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= E_3 - E_1 = \left(E_V + \delta_{1,3} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{n3}^*} \right) - \left(E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{n1}^*} \right) = \\ &= \delta_{1,3} + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{m_{n1}^* - m_{n3}^*}{m_{n1}^* m_{n3}^*}. \end{aligned} \quad (6.46)$$

ეს გადასვლები დაშვებულია და შთანთქმის კოეფიციენტს აქვს შემდეგი სახე:

$$\alpha(\hbar\omega) = C_c (\hbar\omega - \delta_{1,3})^{1/2} \exp\left(\frac{\hbar\omega - \delta_{1,3}}{k_0 T} \frac{m_{n1}^* - m_{n3}^*}{m_{n3}^*} \right). \quad (6.47)$$

ნახ. 6.10.-ზე ნაჩვენები ხვრელების შესაძლო შიდაზონური გადასვლებიდან შთანთქმის სპექტრში ძირითადად გვხვდება 1-2 და 1-3 მძიმე ხვრელების ზონიდან მიმდინარე გადასვლებით განპირობებული სტრუქტურები

$$(\hbar\omega)_{1,2} = \left(E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hp}^*} \right) - \left(E_V + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lp}^*} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{m_{hp}^* - m_{lp}^*}{m_{hp}^* m_{lp}^*}. \quad (6.48)$$

$$(\hbar\omega)_{1,3} = \left(E_V - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hp}^*} \right) - \left(E_V - \Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}^*} \right) = \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \frac{m_{hp}^* - m_{so}^*}{m_{hp}^* m_{so}^*}. \quad (6.49)$$

გადასვლები აკრძალულია და, შესაბამისად, შთანთქმის კოეფიციენტისათვის გვექნება

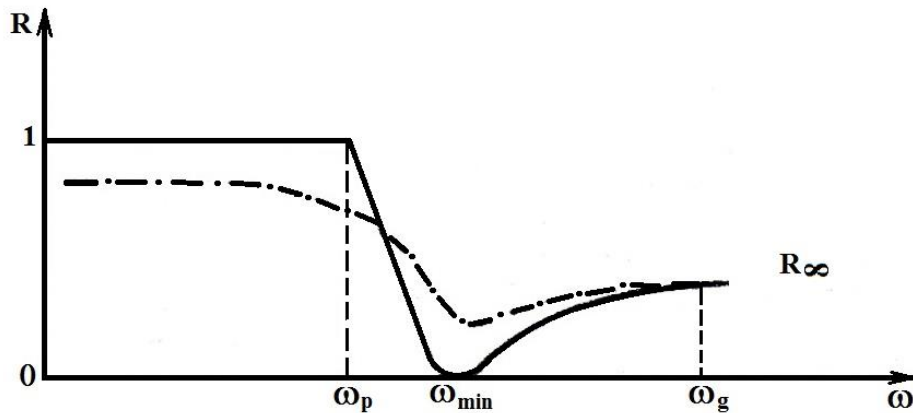
$$\alpha(\hbar\omega)_{1,3} = C_v (\hbar\omega - \Delta)^{3/2} \exp\left(\frac{\hbar\omega - \Delta}{k_0 T} \frac{m_{hp}^*}{m_{hp}^* - m_{so}^*} \right). \quad (6.50)$$

როგორც ვხედავთ, აღნიშნული შთანთქმის სპექტრის შესწავლა საშუალებას გვაძლევს ვიმსჯელოთ დაშვებული ზონების აგებულების შესახებ, განვსაზღვროთ ქვეზონების გამყოფი ენერგეტიკული ინტერვალები.

6.6. სინათლის არეკვლა მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე (პლაზმური არეკვლა)

მუხტის თავისუფალ გადამტანებს მნიშვნელოვანი წვლილი შეაქვთ არა მარტო შთანთქმის, არამედ არეკვლის სპექტრშიც. თუ კრისტალი არ გამოირჩევა ძლიერი შთანთქმით, მაშინ მუხტის თავისუფალი გადამტანების კოლექტიური რხევითი პროცესების წყალობით (უძრავი კრისტალური მესრის მიმართ) უნდა გამოვლინდეს (ვიწრო სიხშირულ ინტერვალში) არეკვლის კოეფიციენტის მკვეთრი ცვლილება (ნახ.6.11) მის შესაძლო ექსტრემალურ მნიშვნელობებს შორის. ამ

პროცესის მახასიათებელ ω_p რეზონანსულ სიხშირეს – პლაზმურ სიხშირეს, ხოლო არეკვლის სწრაფ ზრდას – არეკვლის პლაზმურ კიდეს უწოდებენ. ის დასაბამს პლაზმური მინიმუმიდან იღებს.



ნახ. 6.11. არეკვლის პლაზმური სტრუქტურა (— თეორია, - · - · - რეალური სპექტრი)

თუ არეკვლის კოეფიციენტის სიხშირული დამოკიდებულების განმსაზღვრელ (6.6) გამოსახულებაში გავითვალისწინებთ სუსტი შთანთქმის ($n^2 \gg k^2$) პირობას, გვექნება

$$R(\omega) = \left[\frac{n(\omega) - 1}{n(\omega) + 1} \right]^2. \quad (6.51)$$

დრუდე-ლორენცის მოდელში $n(\omega)$ განსაზღვრულია (2.43) თანაფარდობით, რომლის მიხედვით n ნულისკენ მიისწრაფვის, როდესაც სინათლის ტალღის სიხშირე მოცემული კრისტალის მუხტის თავისუფალი გადამტანებისათვის დამახასიათებელ პლაზმურ სიხშირეს უტოლდება. ამის გამო, არეკვლის კოეფიციენტი (6.51) მართლაც ნახტომისებურად უნდა გაიზარდოს ერთამდე და შეინარჩუნოს ეს სიდიდე $\omega < \omega_p$ ყველა შესაძლო სიხშირისათვის.

რეალურ კრისტალში შთანთქმის სრული უგულებელყოფა შეუძლებელია. სწორედ იგი განაპირობებს ექსპერიმენტულად განსაზღვრულ სპექტრში არეკვლის ამპლიტუდის და დამოკიდებულების მკვეთრი რეზონანსული ხასიათის შესუსტებას (ნახ. 6.11).

$\omega > \omega_p$ სიხშირეებისათვის არეკვლის კოეფიციენტი კვლავ იზრდება. ზონათაშორისო გადასვლების შესაბამისი კვანტის ენერგიებისათვის მუხტის თავისუფალი გადამტანების წვლილი არეკვლაში ნაჯერობას აღწევს

$$R_\infty \approx \left(\frac{\sqrt{\epsilon_\infty} - 1}{\sqrt{\epsilon_\infty} + 1} \right)^2. \quad (6.52)$$

პლაზმური რხევის სიხშირე მუხტის თავისუფალი გადამტანების კონცენტრაციისა და ეფექტური მასით განისაზღვრება

$$\omega_p^2 = \frac{e^2 N}{\epsilon_0 \epsilon_\infty m^*}, \quad (6.53)$$

ამიტომ, ოპტიკური სპექტრებიდან პლაზმური სიხშირის დადგენა ეფექტური მასის შეფასების ერთ-ერთ ფართოდ გავრცელებულ მეთოდს წარმოადგენს.

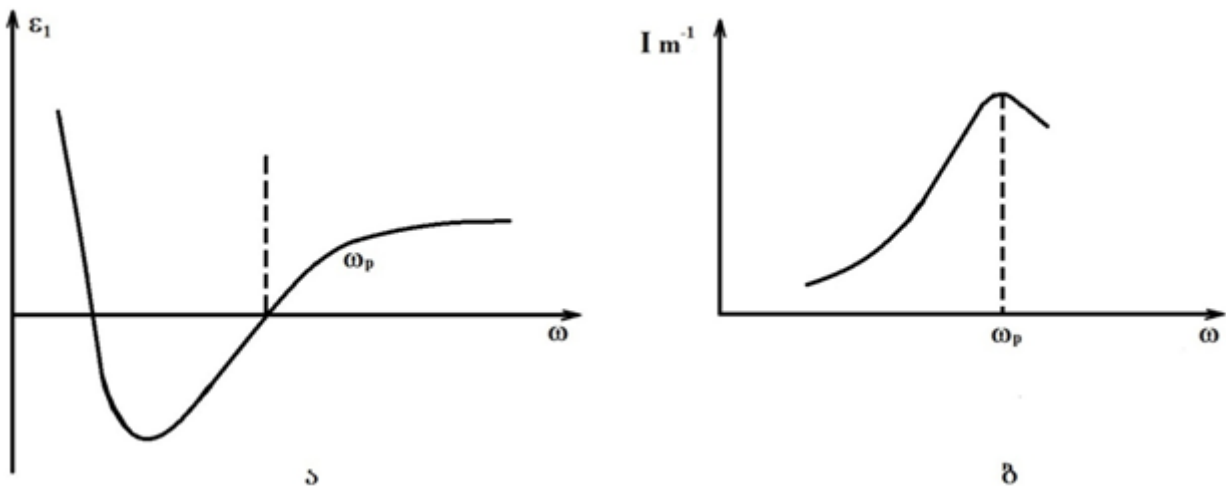
ω_p -ს რიცხვითი მნიშვნელობა შეიძლება მოიძებნოს არეკვლის პლაზმური მინიმუმის ენერგეტიკული მდგომარეობის მიხედვით

$$\omega_{\min} = \omega_p \sqrt{\frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_\infty - 1}}. \quad (6.54)$$

ცდომილება აქ შეიძლება მნიშვნელოვანი იყოს; ω_p -ს დადგენის სიზუსტის გასაზრდელად გამოიყენება დიელექტრიკული შეღწევადობის $\epsilon_1(\omega)$ ნამდვილი ნაწილის და ე.წ. დანაკარგების ფუნქციის სპექტრები (ნახ. 6.12)

$$I_m \frac{1}{\epsilon(\omega)} = \frac{\epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1^2(\omega) + \epsilon_2^2(\omega)}. \quad (6.55)$$

პირველ შემთხვევაში, ω_p -ს განმსაზღვრელია $\epsilon_1(\omega)$ დამოკიდებულების მიერ ნულოვანი მნიშვნელობის გადაკვეთა დადებითი დახრილობით, მეორეში – $I_m \epsilon(\omega)^{-1}$ სპექტრში მაქსიმუმის მდებარეობა.



ნახ. 6.12 მუხტის თავისუფალი გადამტანების წვლილი დიელექტრიკული შეღწევადობის ნამდვილი ნაწილის (ა) და დანაკარგების ფუნქციის (ბ) სპექტრებში

6.7. შთანთქმა მესრის სიბურ რხევებზე

კრისტალური მესრის ატომების რხევების მიერ სინათლის უშუალო შთანთქმისას ფოტონის ენერგია გარდაიქმნება ფონონის ენერგიად. ასეთი სახის გარდაქმნებს ადგილი აქვს ისეთ ნახევრად გამტარებში, რომლებშიც ქიმიური ბმა იონური (ან ნაწილობრივ იონური) ხასიათისაა. ამიტომ, ეს შენაერთები შეიძლება განვიხილოთ, როგორც ელექტრული დიპოლების ერთობლიობა, რომლებსაც შეუძლიათ ელექტრომაგნიტურ გამოსხივებასთან ურთიერთქმედება. სინათლის მაქსიმალურ შთანთქმას მაშინ აქვს ადგილი, როდესაც მისი სიხშირე ემთხვევა დიპოლის საკუთარი რხევის სიხშირეს. რადგან კრისტალური მესერი შთანთქავს მხოლოდ გარკვეული ენერგიის მქონე ფოტონებს, ოპტიკური პარამეტრების სპექტრები ხასიათდება შთანთქმის ამ მექანიზმით განპირობებული მთელი რიგი მაქსიმუმებით, რომლებიც ღრმა ინფრაწითელ არეში არიან განლაგებული.

მესრის რხევებით შთანთქმული სინათლის სიხშირე შეიძლება დაკავშირებული იყოს ამ რხევების როგორც ოპტიკურ, ასევე აკუსტიკურ შტოსთან. იმ შემთხვევაში, როდესაც ადგილი აქვს ერთფონონიან შთანთქმას, ე.ი. ერთი ფოტონის შთანთქმისას კრისტალში წარმოიქმნება ერთი ფონონი, ენერგიისა და იმპულსის მუდმივობის კანონები განაპირობებენ მხოლოდ განივი ოპტიკური (TO) ფონონის წარმოქმნას, ოპტიკური პარამეტრების სპექტრებში ჩნდება რეზონანსული ზოლი, რომელსაც ნარჩენი სხივების ზოლს უწოდებენ (ნახ. 6.13). დიელექტრული შედწევადობის დისპერსიულ დამოკიდებულებას ერთფონონიანი შთანთქმისათვის შემდეგი სახე აქვს:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{\omega_t^2 - \omega^2} \omega_t^2. \quad (6.56)$$

ε_s და ε_∞ – ნარჩენი სხივების ზოლის მიმართ დაბალსიხშირული (სტატიკური) და მაღალსიხშირული დიელექტრიკული შედწევადობები ერთმანეთთან დაკავშირებული არიან ლიდენ-საქს-ტელერის თანაფარდობით

$$\frac{\varepsilon_\infty}{\varepsilon_s} = \frac{\omega_t^2}{\omega_l^2} \quad (6.57)$$

ω_t და ω_l მესრის განივი და გრძივი რხევების სიხშირეებია.

(6.57) გამოსახულების (6.56)-ში გათვალისწინებით მივიღებთ

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_t^2 - \omega_l^2}{\omega^2 - \omega_t^2} \right). \quad (6.58)$$

(6.56)-(6.58) ფორმულების ანალიზი გვიჩვენებს, რომ $\varepsilon(\omega)$ მონოტონურად იზრდება ε_s მნიშვნელობიდან (როდესაც $\omega^2 \ll \omega_t^2$) უსასრულობამდე (როდესაც $\omega \rightarrow \omega_l$).

სისშირის შემდგომი ზრდისას $\varepsilon(\omega)$ -ს მნიშვნელობა ნახტომისებურად იცვლება $+\infty$ -დან $-\infty$ -მდე და ინარჩუნებს უარყოფით მნიშვნელობებს რაღაც ω_{\max} სისშირემდე, რომელიც აკმაყოფილებს განტოლებას

$$\varepsilon(\omega_{\max}) = \varepsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_l^2 - \omega_t^2}{\omega_{\max}^2 - \omega_t^2} \right) = 0. \quad (6.59)$$

ამრიგად, $(\omega_l \rightarrow \omega_t)$ სისშირულ ინტერვალში გარდატეხის მაჩვენებელი წარმოსახვით სიდიდეს $(n = \sqrt{\varepsilon})$ წარმოადგენს და, მაშასადამე, არეკვლის კოეფიციენტი (შთანთქმის უგულებელყოფისას $-n^2 \gg k^2$ გათვალისწინებით)

$$R = \left| \frac{n-1}{n+1} \right|. \quad (6.60)$$

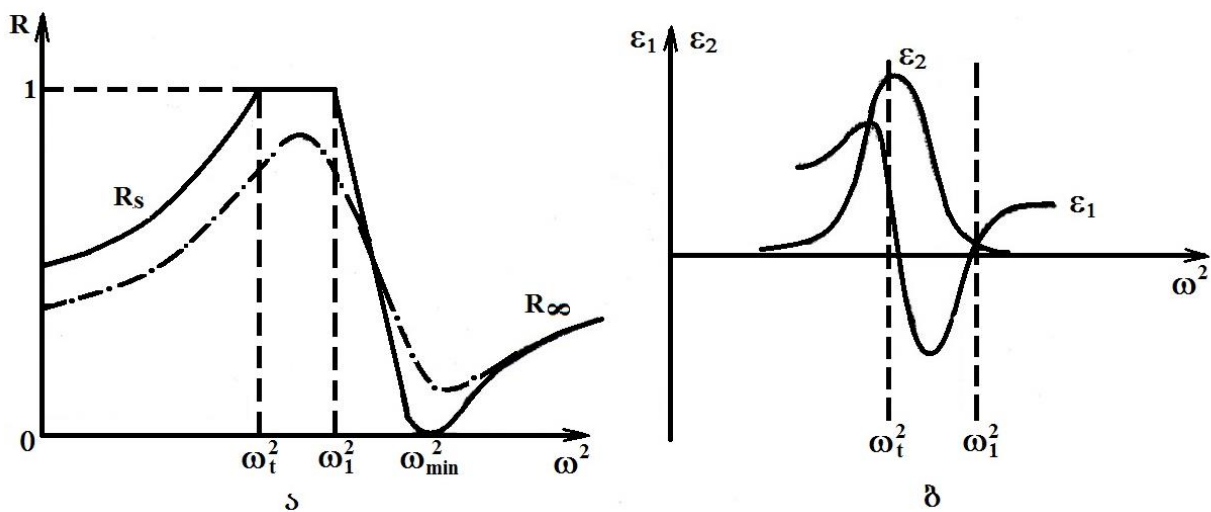
მისწრაფვის ერთისაკენ, ე.ი. სისშირეთა ამ დიაპაზონში კრისტალი მთლიანად ირეკვლავს მასზე დაცემულ სინათლეს. რადგან რეალურ კრისტალში, ცხადია, k არ არის ნულის ტოლი, ამიტომ R ვერ აღწევს თეორიის შესაბამის $R=1$ ზღვრულ მნიშვნელობას (ნახ. 6.13. ა).

სისშირის შემდგომი ზრდისას, ω_l -დან რაღაც ω_{\min} მნიშვნელობამდე, არეკვლის კოეფიციენტი ნულამდე მცირდება. ω_{\min} სისშირე შეიძლება გამოვითვალოთ განტოლებიდან

$$\varepsilon(\omega_{\min}) = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}}{\omega_t^2 - \omega_{\min}^2} \omega_t^2 = 1. \quad (6.61)$$

საიდანაც გამომდინარეობს, რომ

$$\omega_{\min}^2 = \omega_t^2 \frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_{\infty} - 1}. \quad (6.62)$$



ნახ. 6.13. ოპტიკური პარამეტრების სპექტრები „ნარჩენი სხივების ზოლის“ სპექტრალურ არეში.

ა) არეკვლა (— თეორია, - - - - რეალური სპექტრი). ბ) დიელექტრიკული შეღწევადობის ნამდვილი და წარმოსახვითი ნაწილების რეალური სპექტრები

ნარჩენი სხივების ზოლში ($\omega_i \rightarrow \omega_i$), არეკვლისა და გამჭირვალობის თეორიული სპექტრების რეალურთან შესათანხმებლად, შემოტანილია ე.წ. ჩაქრობის კოეფიციენტი γ , რომლის გათვალისწინებითაც დიელექტრიკული შეღწევალობის ნამდვილი და წარმოსახვითი ნაწილები მიიღებს სახეს (ნახ. 6.13.ბ)

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_\infty \left[1 + \frac{(\omega_i^2 - \omega_i^2)(\omega_i^2 - \omega^2)}{(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma^2} \right] \quad (6.63)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\gamma \omega (\omega_i^2 - \omega_i^2)}{(\omega_i^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma^2} \quad (6.64)$$

ისეთ ნახევრად გამტარებში, რომლებშიც ქიმიური ბმა კოვალენტური ხასიათისაა, შეიძლება ადგილი ჰქონდეს მრავალფონონიან შთანთქმასაც – ფოტონი შთანთქმება ფონონების გარკვეული (მოცემულ კრისტალისათვის დამახასიათებელი) კომბინაციით. ამ კომბინაციებში შეიძლება მონაწილეობა მიიღონ როგორც ოპტიკურმა, ისევე აკუსტიკურმა ფონონებმაც, რის გამოც კომბინაციების რიცხვი ძალიან დიდია და ეს კი, თავის მხრივ, განაპირობებს ფონონური შთანთქმის სპექტრის რთულ ხასიათს. გარდა ამისა, მრავალფონონიანი პროცესებისათვის დამახასიათებელი შთანთქმის კოეფიციენტის მნიშვნელობა მცირეა და ამიტომ, ენერგეტიკულად ერთმანეთთან ახლოს განლაგებული დაბალი ინტენსივობის შთანთქმის ცალკეული სტრუქტურების გარჩევა ექსპერიმენტულად გაძნელებულია. მრავალფონონიანი შთანთქმის სპექტრი ინფრაწითელ უნაბში ქმნის ზოლს, რომლის ფონზეც გამოირჩევიან განსაკუთრებით დიდი ალბათობის მქონე კომბინაციების შესაბამისი ცალკეული პიკები.

არსებობს სინათლის მესრის სითბურ რხევებთან ურთიერთქმედების კიდევ ერთი მექანიზმი. კრისტალში გავლისას მესრის რხევებთან ურთიერთქმედების გამო ფოტონმა შეიძლება შეიცვალოს ენერგია და იმპულსი. ამ დროს ფოტონი შთანთქმება არა მთლიანად, არამედ თავისი ენერგიისა და იმპულსის მხოლოდ ნაწილს გადასცემს მესერს. ამგვარად, თუ კრისტალს დავასხივებთ მონოქრომატულ სინათლეს, მაშინ კრისტალიდან გამოსულ სინათლეში შეიძლება აღმოვაჩინოთ ისეთი ფოტონები, რომელთაც ექნებათ თავდაპირველთან შედარებით განსხვავებული სიხშირე და ტალღური ვექტორი. ფოტონების გაბნევას ოპტიკურ ფონონებზე ეწოდა რამან-მანდელშტამის გაბნევა, ხოლო აკუსტიკურ ფონონებზე – ბრილუენის გაბნევა.

თაზო VII

მაგნიტოოპტიკური და ოსცილაციური მოვლენები

7.1. დისპერსიის კანონი მაგნიტურ ველში.

ლანდაუს დონეები

თავის სათაურში გამოტანილი მოვლენების კლასში აერთიანებენ ეფექტებს, რომლებიც ავლენენ ძლიერი მაგნიტური ველის სიდიდეზე კრისტალის კინეტიკური, ოპტიკური და თერმოდინამიკური კოეფიციენტების არამონოტონულ, ხშირად რეზონანსულ დამოკიდებულებას. ამის მიზეზი კი ის არის, რომ B მაგნიტური ინდუქციის ვექტორის მართობულ სიბრტყეში ლორენცის ძალის გავლენით ელექტრონის მოძრაობა წრიულ ორბიტაზე იკვანტება. ელექტრონის კვაზიუწყვეტი ენერგეტიკული სპექტრი მკვეთრად გამოხატულ დისკრეტულ, ხოლო მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერგიაზე დამოკიდებულება – ოსცილაციურ ხასიათს იღებს.

წრიულ ორბიტაზე ელექტრონის მოძრაობის სიხშირე – ციკლოტრონული ω_c სიხშირე – მარტივად დგინდება იმის გათვალისწინებით, რომ ლორენცის ძალა წარმოადგენს ცენტრისკენულ ძალას

$$\frac{m^* v^2}{R} = evB \quad (7.1)$$

და

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (7.2)$$

სწორედ ეს სიხშირე განსაზღვრავს ელექტრონის ერთი წრიული ორბიტიდან მეორე წრიულ ორბიტაზე გადასასვლელად საჭირო ენერგიას, ანუ ენერგეტიკულ ღრეხოს მაგნიტური ველით გახლეჩილი დაშვებული ზონის მაგნიტურ ქვეზონებს (ლანდაუს დონეებს) შორის, ასევე – ზონის ნულოვანი დონის წანაცვლებას საწყისი მდებარეობის მიმართ. ნახ. 7.1-ზე წარმოდგენილია დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონის მქონე გამტარობის ზონის ტრანსფორმაცია z – დერძის გასწვრივ მოღებულ ძლიერი მაგნიტური ველის პირობებში. დისპერსიის კანონი ასე ჩაიწერება (ჩავთვალოთ, რომ $E_c = 0$):

$$E(N, k_z) = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_n^*}. \quad (7.3)$$

პირველი, დისკრეტულად ცვლადი შესაკრები – განსაზღვრავს ელექტრონის ენერგიას xy სიბრტყეში ($N = 0, 1, 2, \dots$ წრიული ორბიტის და, შესაბამისად, ლანდაუს დონის რიგობრივი ნომერია), მეორე, უწყვეტი – შეესაბამება ელექტრონის მოძრაობას მაგნიტური ველის მიმართულების გასწვრივ. მაშასადამე, ძლიერი

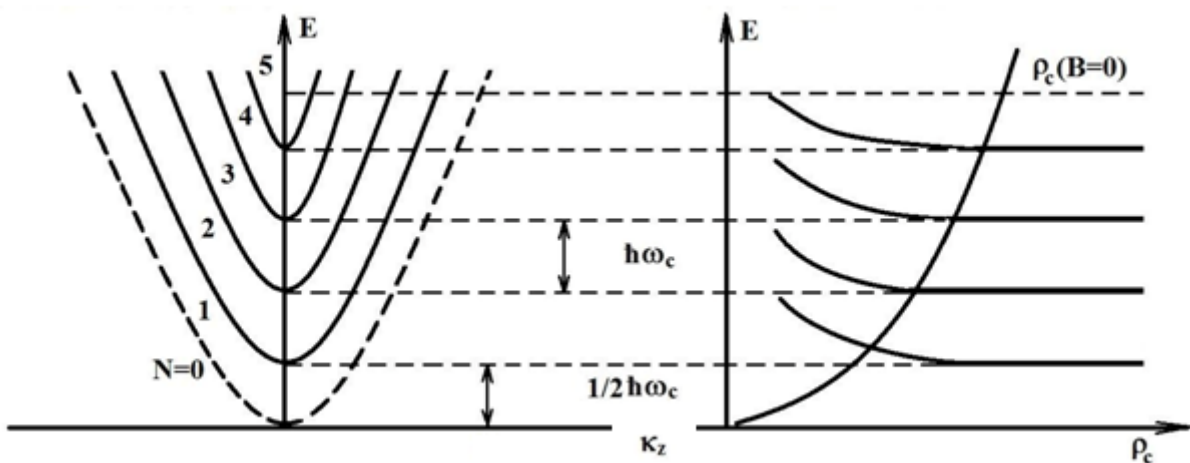
მაგნიტური ველის პირობებში ელექტრონის ენერჯის ტალღურ ვექტორზე კვაზი-უწყვეტი დამოკიდებულება ვლინდება უკვე მხოლოდ ცალკეული ლანდაუს დონისათვის და ისიც მხოლოდ ტალღური ვექტორის ერთი (k_z) კომპონენტისათვის. სამგანზომილებიანი კვაზიუწყვეტი ზონა შეიცვალა ერთგანზომილებიანი კვაზიუწყვეტი ენერგეტიკული ზონების დისკრეტულ სისტემად. (7.3)-ის შესაბამისად იცვლება აკრძალული ზონის სიგანეც და მისი ნაზრდი, (7.2)-ის გათვალისწინებით, მაგნიტური ინდუქციის სიდიდით და მუხტის გადამტანების ეფექტური მასით განისაზღვრება

$$\delta(\Delta E_g) = \frac{\hbar}{2} (\omega_{cn} + \omega_{cp}) = \frac{\hbar e B}{2} \left(\frac{1}{m_n^*} + \frac{1}{m_p^*} \right) = \frac{\hbar e B}{2m_r^*}. \quad (7.4)$$

ლანდაუს დონეთა ფორმირება ნიშნავს, რომ გამტარობის, თუ სავალენტო ზონების მდგომარეობათა სიმკვრივე ცალკეულ ლანდაუს დონეთა მდგომარეობების სიმკვრივის ჯამის სახით უნდა იყოს წარმოდგენილი

$$\rho_{CB}(E) = \frac{m^{*3/2} \omega_c}{2\sqrt{2}\pi^2 \hbar^2} \sum_N \left[E - \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2}. \quad (7.5)$$

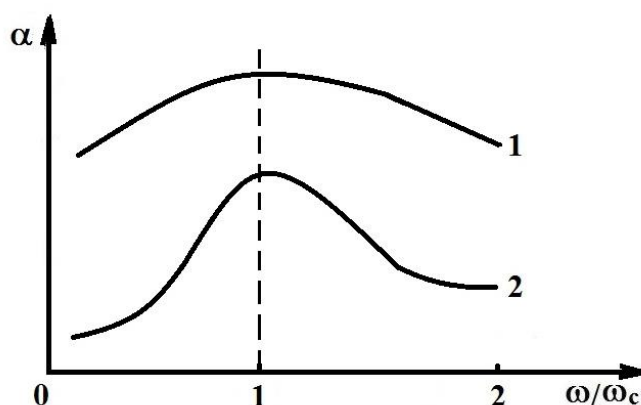
ამ ჯამში თითოეული შესაკრების ენერჯიაზე დამოკიდებულების ჰიპერბოლური ხასიათი (თითოეული ქვეზონის მდგომარეობის სიმკვრივე მიისწრაფვის უსასრულობისკენ $k_z = 0$ წერტილის მახლობლობაში) განაპირობებს სწორედ (ნახ. 7.1 ბ) მდგომარეობათა სიმკვრივის ოსცილაციებს (არამონოტონურობას). ელექტრონის სპინის გათვალისწინება, ცხადია, განაპირობებს ლანდაუს დონეთა რიცხვის გაორმაგებას, სპინის მიხედვით გადაგვარების მოხსნის გამო.



ნახ. 3.1. გამტარობის ზონის (ა) და მდგომარეობათა სიმკვრივის ენერჯიაზე დამოკიდებულების (ბ) ტრანსფორმაცია ძლიერ მაგნიტურ ველში

7.2. ციკლოტრონული რეზონანსი

მყარი სხეულების ოპტიკური მუდმივების სპექტრალური დამოკიდებულებების რეზონანსული ხასიათი ძლიერ მაგნიტურ ველში, კრისტალის ზოგიერთი ფუნდამენტური პარამეტრის მაღალი სიზუსტით დადგენის საშუალებას იძლევა. კერძოდ, შთანთქმის რეზონანსული მაქსიმუმი კრისტალზე დაცემული ელექტრომაგნიტური გამოსხივების სიხშირეთა იმ არეში, რომელიც ციკლოტრონულ სიხშირეს შეესაბამება (ნახ. 7.2) – ციკლოტრონული რეზონანსი – მუხტის გადამტანების ეფექტური მასის განსაზღვრის კარგად დამუშავებულ მეთოდს უდევს საფუძვლად.



ნახ. 7.2. ციკლოტრონული რეზონანსი $\omega_c\tau$ -ს ერთის და ორის ტოლი მნიშვნელობებისათვის

რეზონანსი $\alpha(\omega)$ დამოკიდებულებაში მით უფრო მკვეთრად გამოვლინდება, რაც უფრო მეტი ბრუნვის შესრულებას მოასწრებს (მაგნიტური ველის გავლენით) მუხტის გადამტანი თავისუფალი განარბენის შესაბამის დროში, ანუ, რაც უფრო კარგად შესრულდება $\omega_c\tau \gg 1$ პირობა. ვინაიდან ω_c რადიოსიხშირეთა დიაპაზონს შეესაბამება, აღნიშნული პირობის შესასრულებლად $\tau \approx 10^{-10}$ წმ-ის რიგის უნდა იყოს. რეალურ, საკმაოდ სრულყოფილ ნახევარად გამტარშიც კი, ოთახის ტემპერატურაზე $\tau \approx 10^{-14} - 10^{-15}$ წმ. ამიტომ, ციკლოტრონული რეზონანსი დამაკმაყოფილებლად გამოვლინდება მხოლოდ ძალიან დაბალ ტემპერატურაზე, როდესაც მოხერხდება მუხტის გადამტანის მოძრაობაზე სტრუქტურული არაერთგვაროვნების გავლენის შესუსტება და, ე.ი. τ -ს გაზრდა.

რეზონანსული მაქსიმუმის (ნახ. 7.2) სიხშირული მდებარეობის მიხედვით დგინდება ω_c -ს მნიშვნელობა და, მაშასადამე, (7.2) ეფექტური მასაც, რომელსაც ხშირად ციკლოტრონულ მასას უწოდებენ. კონკრეტული კავშირი მუხტის გადამტანების ეფექტური მასის კომპონენტებსა და ამ ციკლოტრონულ მასას

შორის დამოკიდებულია დისპერსიის კანონის სახეზე, ზონების სიმეტრიაზე. პარაბოლური, სფერული სიმეტრიის ზონების შემთხვევაში მასები უბრალოდ უტოლდება ერთმანეთს,

$$m^* = m_c^* = \frac{eB}{\omega_c} \quad (7.6)$$

ხოლო ანოზოტროპული ზონებისთვის კავშირი m_c^* და m_1^*, m_2^*, m_3^* მასებს შორის იზოენერგეტიკული ზედაპირის დერძების და მაგნიტური ინდუქციის ვექტორის ურთიერთგანლაგებით განისაზღვრება

$$\frac{1}{m_c^{2*}} = \frac{\cos^2 \alpha_1}{m_2^* m_3^*} + \frac{\cos^2 \alpha_2}{m_1^* m_3^*} + \frac{\cos^2 \alpha_3}{m_1^* m_2^*}. \quad (7.7)$$

ამდენად, ეფექტური მასის ტენზორის თითოეული კომპონენტის დასადგენად ცდები მაგნიტური ველის სხვადასხვა მიმართულებებისას უნდა განხორციელდეს.

7.3. ზონათაშორისო მაგნიტოშთანთქმა

ძლიერ მაგნიტურ ველში ელექტრონის ენერგეტიკული სპექტრის მნიშვნელოვანი ტრანსფორმაცია, ცხადია, გავლენას მოახდენს ოპტიკური პროცესების მიმდინარეობაზე, როგორც ზონათაშორისო, ასევე მინარეული შთანთქმის არეშიც. ზონათაშორისო შთანთქმის მაგნიტური ველზე დამოკიდებულების შესწავლა აკრძალული ზონის სიგანის მაღალი სიზუსტით დადგენის მძლავრ მეთოდს წარმოადგენს.

7.1 პარაგრაფის შესაბამისად, z დერძის გასწვრივ მიმართული ძლიერი მაგნიტური ველისას სფერული სიმეტრიის დაშვებული ზონების აბსოლუტური ექსტრემუმების დისპერსიის კანონები ასე ჩაიწერება (სპინის გაუთვალისწინებლად):

$$E_2 = E_c + \left(N_c + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{c_n} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_n^*}. \quad (7.8)$$

$$E_1 = E_v - \left(N_v + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{c_p} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_p^*}. \quad (7.9)$$

მაშინ

$$\hbar \omega = E_2 - E_1 = \Delta E_g + \left(N + \frac{1}{2} \right) \left(\hbar \omega_{c_n} + \hbar \omega_{c_p} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_r^*}. \quad (7.10)$$

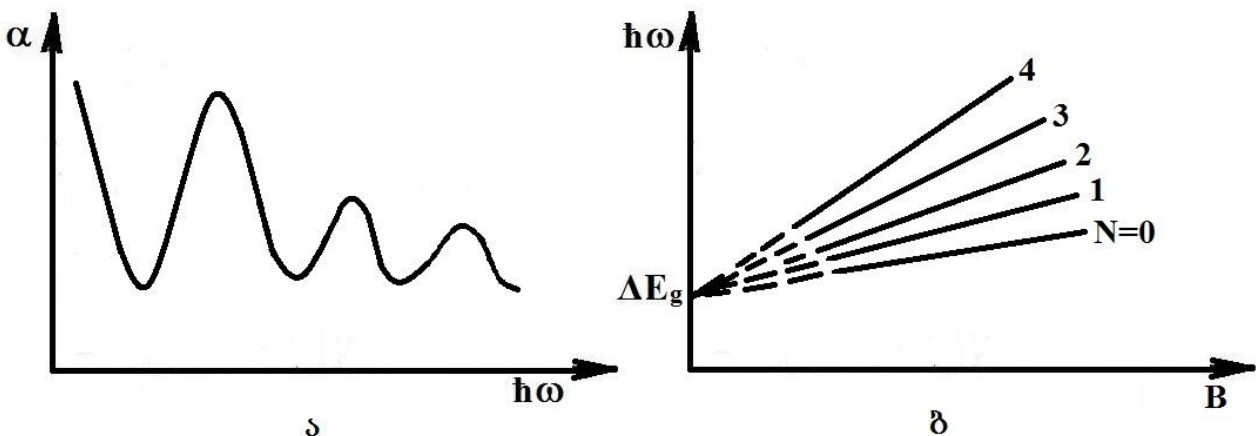
კვანტის შთანთქმისას შესაძლებელი ხდება ელექტრონის გადასვლა სავალენტო და გამტარობის ზონების ლანდაუს დონეებს შორის. (7.10)–ში გათვალისწინებულია მკაცრი შერჩევის წესი, რომლის თანახმად ძლიერ მაგნიტურ ველში მოთავსებულ

კრისტალში შესაძლებელია ელექტრონის მხოლოდ ისეთი გადასვლები დაშვებული ზონების დისკრეტულ ქვეზონებს შორის, რომლებსთვისაც

$$\Delta N = N_c - N_v = 0, \quad (7.11)$$

ანუ, თუ $N_c = N_v = N$. შთანთქმის მონოტონური სიხშირული დამოკიდებულება შეიცვლება შთანთქმის კოეფიციენტის ოსცილაციებით $\hbar\omega > \Delta E_g$ არეში (ნახ. 7.3). ამავე დროს, მაგნიტური ველის მიმართულების გასწვრივ ელექტრონის ენერჯიის ცვლილების კვაზიუწყვეტი ხასიათის შენარჩუნების გამო, შთანთქმის კოეფიციენტის მაქსიმუმები გამოვლინდება საკმაოდ მაღალი საერთო შთანთქმის ფონზე.

ვინაიდან მაგნიტურ ქვეზონებს შორის ენერგეტიკული ინტერვალი ω_c სიხშირით განისაზღვრება, ხოლო ეს უკანასკნელი კი B -ს სიდიდეზეა დამოკიდებული, ამიტომ, მაგნიტური ველის ცვლილებებისას შეიცვლება შთანთქმის მაქსიმუმების ენერგეტიკული მდებარეობაც სპექტრში. თუ სავალენტო და გამტარობის ზონების ლანდაუს დონეთა რამოდენიმე წყვილს შორის ელექტრონული გადასვლებით განპირობებული შთანთქმის მაქსიმუმების მდებარეობას აღვრიცხავთ (B -ს სხვადასხვა მნიშვნელობებისას), მაშინ ამ მონაცემების საფუძველზე აგებული გრაფიკული დამოკიდებულებების ექსტრაპოლაციით $B=0$ მნიშვნელობისაკენ (ნახ. 7.3) დავადგენთ ნახევრად გამტარის აკრძალული ზონის სიგანეს, სტანდარტულ ოპტიკურ მეთოდებთან (თავი VI) შედარებით, მნიშვნელოვნად მეტი სიზუსტით. ამ გრაფიკების ($N > 1$ ნომრით) დახრილობა გვაძლევს m_r^* დაყვანილი ეფექტური მასის შეფასების საშუალებას.

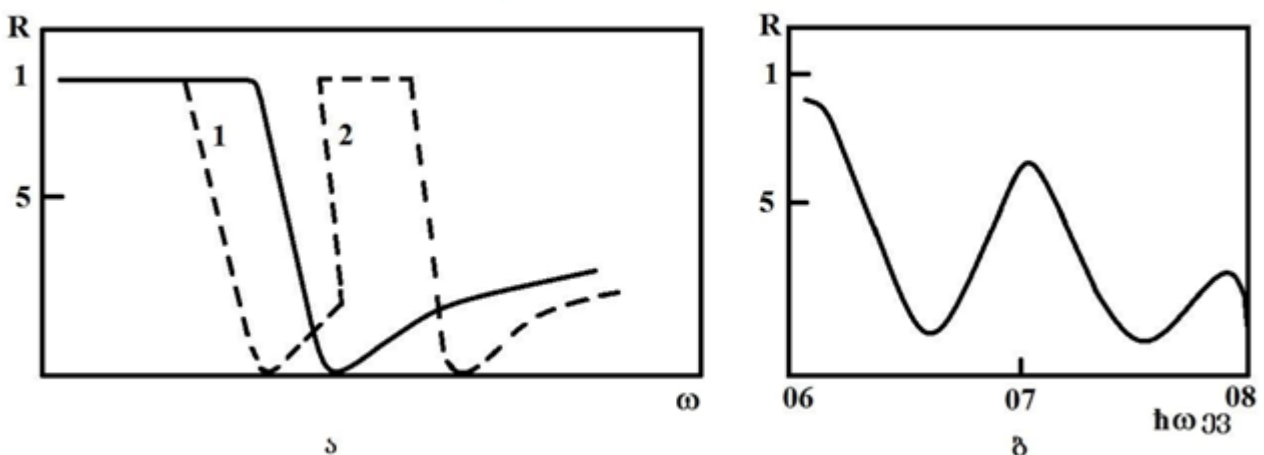


ნახ. 7.3. შთანთქმის კოეფიციენტის ოსცილაციები (ა) და ამ მაქსიმუმების ენერგეტიკული მდებარეობის დამოკიდებულება მაგნიტური ველის სიდიდეზე (ბ)

შთანთქმის კოეფიციენტის ოსცილაციები ვლინდება სპექტრის მინარეულ არეშიც (შესაძლო ელექტრონული გადასვლები განხილულია 6.4 §-ში), რაც მინარეული მდგომარეობის მაგნიტურ ველში გახლეჩით არის განპირობებული (ზეემანის ეფექტი). მინარეული შთანთქმის მაქსიმუმების ენერგეტიკული მდგომარეობის მიხედვით დგინდება სისშირე და, ამდენად, მუხტის გადამტანების ეფექტური მასა იმ დაშვებულ ზონაში, რომელთანაც დაკავშირებულია სპექტრის ამ უბნის ფორმირებაზე პასუხისმგებელი მინარეული მდგომარეობა.

7.4. მაგნიტოოპტიკური მოვლენები. ფარადეის და ფოიხტის ეფექტები

კრისტალის ოპტიკური მახასითებლების მგრძობიარობა ძლიერი მაგნიტური ველის მიმართ მრავალ ოპტიკურ მოვლენას განაპირობებს: 1. ფარადეის ეფექტი – კრისტალში გასული ელექტრომაგნიტური გამოსხივების პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნება; 2. კერის ეფექტი – ფარადეის ანალოგიური, ოღონდ არეკვლილ სხივებში მიმდინარე პროცესი; 3. ფოიხტის (ან კოტონ-მუტონის) ეფექტი – სინათლის ორმაგი სხივოტეხის მოვლენა – კრისტალში გავლისას სინათლის წრფივი პოლარიზაცია იცვლება ელიფსური პოლარიზაციით; 4. მაგნიტოპლაზმური არეკვლა – არეკვლის პლაზმური კიდის ტრანსფორმაცია და არეკვლის ერთი პლაზმური მინიმუმის (6.6) ორით შეცვლა ძლიერ მაგნიტურ ველში (ნახ. 7.4).



ნახ. 7.4. არეკვლის პლაზმური კიდე. ა) თეორია; 1 - $\vec{B}=0$; 2 - $\vec{B} \perp \vec{c}$;
ბ) არეკვლის ორი პლაზმური მინიმუმი *InSb*-ის კრისტალში

მაგნიტოოპტიკური მოვლენების შესწავლა, უმეტეს შემთხვევაში, მიზნად ისახავს მუხტის გადამტანების ეფექტური მასის დადგენას. ვნახოთ, თუ როგორ შეიძლება განხორციელდეს ეს ფარადეის და ფოიხტის ეფექტების საფუძველზე.

ფარადეის ეფექტი აღიძვრება, თუ წრფივად პოლარიზებული ელექტრომაგნიტური გამოსხივება კრისტალში ვრცელდება მაგნიტური ველის პარალელურად. ცნობილია, რომ წრფივი პოლარიზაცია შეიძლება წარმოდგენილი იყოს ორი წრიული მდგენელის (მარჯვენა და მარცხენა წრიული პოლარიზაცია) მეშვეობით, რომლებიც ხასიათდებიან n_R და n_L გარდატეხის მაჩვენებლებით (თუ $\vec{B} = 0$, მაშინ $n_R = n_L$). მაგნიტურ ველში n_R და n_L გარდატეხის მაჩვენებელთა ტოლობა ირღვევა, ჩნდება სვლათა სხვაობა წრიულად პოლარიზებულ მდგენელებს შორის, რაც ვლინდება კრისტალიდან გამოსული, კვლავ წრფივად პოლარიზებული სინათლის პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნებით გარკვეული Θ კუთხით

$$\Theta = \frac{\omega d}{2c} (n_R - n_L), \quad (7.12)$$

აქ ω სინათლის სიხშირეა; ხოლო d – კრისტალის სისქე.

პირდაპირპროპორციული კავშირი შემობრუნების კუთხესა და მაგნიტური ველის სიდიდეს შორის მყარდება V ვერდეს კოეფიციენტით,

$$\Theta = VdB, \quad (7.13)$$

რომელიც კრისტალის მახასიათებელ ისეთ მნიშვნელოვან პარამეტრებზეა დამოკიდებული, როგორცაა მუხტის გადამტანების ეფექტური მასა და კონცენტრაცია. მაგნიტური ველის მიმართულების ცვლილება საპირისპიროზე განაპირობებს პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების მიმართულების ცვლილებასაც.

მაგნიტური ველის გავლენით პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნება ვლინდება სპექტრის მხოლოდ ისეთ არეში, სადაც მნიშვნელოვანია სინათლის დისპერსია ($dn/d\omega \neq 0$). ნახევრად გამტარების ოპტიკური პროცესების თავისებურებებიდან (თავი VI) გამომდინარე, ფარადეის ეფექტი შეიძლება გამოვლინდეს როგორც ელექტრონის ზონათაშორისო გადასვლების არეში, ასევე ($\omega < \omega_g$) უფრო მცირე სიხშირეებზე, თუ კი მნიშვნელოვანია მუხტის თავისუფალი გადამტანების წვლილი (მათი კონცენტრაცია N არ არის ძალიან მცირე).

n -ტიპის ნახევრად გამტარში მუხტის თავისუფალი გადამტანებით განპირობებული ფარადეის ეფექტისათვის

$$V = \frac{A}{\epsilon_0 n \omega^2} \frac{N}{m_n^{*2}}. \quad (7.14)$$

თუ გამტარობის ზონის იზოენერგეტიკული ზედაპირი ბრუნვით ელიფსოიდს წარმოადგენს, მაშინ

$$V = \frac{A}{\varepsilon_0 n \omega^2} \frac{K(K+2)N}{3m_{\parallel}^{*2}}. \quad (7.15)$$

აქ $K = \frac{m_{\parallel}^*}{m_{\perp}^*}$ ანიზოტროპიის კოეფიციენტი, ხოლო $A = e^3/2c$.

p ტიპის ნახევრად გამტარში, p_h მძიმე და p_l მსუბუქი ხვრელების კონცენტრაციების გათვალისწინებით ვერდეს კოეფიციენტისათვის გვექნება

$$V = \frac{A}{\varepsilon_0 n \omega^2} \left(\frac{p_h}{m_{hp}^{*2}} + \frac{p_l}{m_{lp}^{*2}} \right). \quad (7.16)$$

კრისტალის შთანთქმის კიდის მახლობლად ($\omega < \omega_g$) ვერდეს კოეფიციენტი სინათლის სიხშირეზე რამდენადმე უფრო რთულად არის დამოკიდებული, ვიდრე ეს მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე მიმდინარე ფარადეის ეფექტისათვის იყო დამახასიათებელი

$$V = \frac{A}{\varepsilon_0 n} \frac{N}{m_n^{*2}} \frac{\omega^2}{\omega_g^2 - \omega^2}. \quad (7.17)$$

თუ ინდუქციის ვექტორი კრისტალში სინათლის გავრცელების მიმართულების მართობულია, მაშინ წრფივად პოლარიზებული ელექტრომაგნიტური ტალღის \vec{E} ვექტორის მაგნიტური ველისადმი მართობული და პარალელური მდგენელები სხვადასხვა სიჩქარით გავრცელდებიან, რის შედეგად მათ შორის გაჩნდება ფაზათა სხვაობა δ (წრფივად პოლარიზებული სინათლე გარდაიქმნება ელიფსურად პოლარიზებულად – ფოიხტის ეფექტი)

$$\delta = \frac{\omega d}{c} (n_{\parallel} - n_{\perp}). \quad (7.18)$$

პოლარიზაციის სიბრტყის შემობრუნების კუთხის ანალოგიურად, ფოიხტის ეფექტის ძირითადი მახასიათებელი პარამეტრი δ ფაზათა სხვაობა – მუხტის გადამტანების ეფექტური მასით და კონცენტრაციით განისაზღვრება

$$\delta = \frac{\pi e^4}{\varepsilon_0 n \omega^3} \frac{N}{m_n^{*3}} B^2 d. \quad (7.19)$$

როგორც წარმოდგენილი გამოსახულებებიდან გამომდინარეობს, ფარადეის ან ფოიხტის ეფექტი საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ მუხტის გადამტანების ეფექტური მასა, თუ სხვა ცდების (მგალითად, ჰოლის ეფექტის) საფუძველზე დადგენილია მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია. ამავე დროს, თუ დავეყრდნობით ორივე ეფექტის მონაცემებს, მაშინ, მარტივი სფერული სიმეტრიის დაშვებული

ზონების შემთხვევაში, შესაძლებელი იქნება ეფექტური მასის შეფასება იმ შემთხვევაშიც, თუ კონცენტრაციის სიდიდე ცნობილი არ არის. მართლაც, (7.13), (7.14) და (7.19)-ის შედარებით გვექნება

$$m_n^* = eB\lambda \frac{\Theta}{\delta}, \quad (7.20)$$

აქ λ სინათლის ტალღის სიგრძეა.

ზემოთ განხილული თანაფარდობების გამოყენებისას გათვალისწინებული იყო სამი პირობა, რომელთა შესრულება ექსპერიმენტის ჩატარებისას მარტივია, ალბათური და ხშირად აუცილებელიც: 1) $\omega^2 \tau^2 \gg 1$ (ანალოგიური პირობა და მისი აზრი 7.2§-ში იყო წარმოდგენილი); 2) $\omega^2 \gg \omega_c^2$ – გამორიცხავს რეზონანსული მოვლენების განვითარებას; 3) $n^2 \gg k^2$ – სუსტი შთანთქმის პირობა, რაც უზრუნველყოფს კრისტალში გამოსხივების გავრცელებას.

7.5. ოსცილაციური მოვლენები

ძლიერი მაგნიტური ველის ზემოქმედება ენერგეტიკულ ზონურ სტრუქტურაზე, მდგომარეობათა სიმკვრივეზე და მუხტის გადამტანების კრისტალურ მესერთან ურთიერთქმედების ხასიათზე, განაპირობებს კინეტიკური კოეფიციენტების მაგნიტური ველის სიდიდესა და ტემპერატურაზე დამოკიდებულებების არა მარტო რაოდენობრივ, არამედ თვისობრივ ცვლილებასაც.

მთლიანად გადაგვარებულ ნახევრად გამტარებში ($B \gg 1$), ტემპერატურათა არეში, სადაც უზრუნველყოფილია ლანდაუს დონეთა სითბური გარჩევისუნარიანობა ($k_0 T \ll \hbar \omega_c$) ვლინდება კინეტიკური კოეფიციენტების ოსცილაციური დამოკიდებულება მაგნიტურ ველზე, რაც მარტივ ფიზიკურ ინტერპრეტაციას ექვემდებარება. მაგნიტური ველის და, ამდენად, $\hbar \omega_c$ ენერგიის ზრდისას ლანდაუს დონეთა მოძრაობა ენერგიის მიხედვით, მათ მიერ ფერმის დონის თანმიმდევრული გადაკვეთა განაპირობებს ფერმის დონეზე მდგომარეობათა სიმკვრივის პერიოდულ ცვლილებას. ვინაიდან კინეტიკურ პროცესებში გადამწყვეტ წვლილს სწორედ ფერმის დონეზე მყოფი ელექტრონები უზრუნველყოფენ, მდგომარეობათა სიმკვრივის ქცევის თავისებურებები გამოვლინდება კინეტიკური კოეფიციენტების ოსცილაციებით. მაგნიტური ამთვისებლობის და თერმომაგნიტური კოეფიციენტების აღნიშნული მექანიზმით გამოწვეული ოსცილაციები დე ჰააზ-ვან ალფენის ოსცი-

ლაციების სახელწოდებას ატარებენ, ყველა სხვა კინეტიკური კოეფიციენტებისა კი – შებნიკოვ-დე ჰააზის.

არსებობს კინეტიკური კოეფიციენტების ოსცილაციების სრულიად განსხვავებული მექანიზმიც, რომელიც მუხტის გადამტანების გრძივ ოპტიკურ ფონონებზე არადრეკად რეზონანსულ გაბნევასთან არის დაკავშირებული. ამ მაგნიტოფონონურ ოსცილაციებს ექნებათ ადგილი, თუ ფონონის ენერგია $\hbar\omega_c$ ენერგიის ტოლი ან ჯერადია, რაც უზრუნველყოფს ელექტრონის გაბნევას ორ ლანდაუს დონეს შორის. თუ საწყის და საბოლოო მდგომარეობებში ელექტრონის სპინის გეგმილი საპირისპირო ნიშნისაა, მაშინ ოსცილაციებს სპინმაგნიტოფონონურს უწოდებენ. შებნიკოვ-დე ჰააზის ოსცილაციებისაგან განსხვავებით მაგნიტოფონონური ოსცილაციები შედარებით მაღალ ტემპერატურაზე გამოვლინდება, როდესაც მესერში ოპტიკური ფონონების გარკვეული რაოდენობა იქნება აღზნებული. ამავე დროს, $\hbar\omega_c \gg k_0T$ და $\omega_c\tau \gg 1$ პირობების შესრულების აუცილებლობა განსაზღვრავს შესაძლო ტემპერატურათა ზედა ზღვარს. მაგნიტოფონონური ოსცილაციების პერიოდი განისაზღვრება ოპტიკური ფონონების სიხშირით და მუხტის გადამტანების ეფექტური მასით. ამდენად, პერიოდის დადგენა ამ პარამეტრების სიდიდეზე მსჯელობის საშუალებას გვაძლევს. შებნიკოვ-დე ჰააზის ოსცილაციების პერიოდი კი N მუხტის გადამტანების კონცენტრაციაზეა დამოკიდებული და ამ მოვლენის შესწავლა, მაგალითად, N ტიპის ნახევრად გამტარში, ზონის აბსოლუტური ექსტრემუმის შემადგენლობაში შემავალი მინიმუმების N რიცხვის დადგენის პირდაპირ მეთოდს წარმოადგენს.

რომელიმე კინეტიკური კოეფიციენტის მაგნიტური ველის დამახულობის შებრუნებულ სიდიდეზე დამოკიდებულების პერიოდისათვის მიღებულ ზოგად გამოსახულებას აქვს შემდეგი სახე:

$$\Delta_H = C_H \frac{m_{dn}^*}{m_c^*} N^{-2/3} \quad (7.21)$$

აქ $m_{dn}^* = N^{2/3} (m_1^* m_2^* m_3^*)^{1/3}$ მდგომარეობა და სიმკვრივის ეფექტური მასაა (7.2), m_c^* – ციკლოტრონული ეფექტური მასა (7.7), ხოლო C_H – მუდმივა

$$C_H = \frac{2e}{(3\pi^2)^{2/3} \hbar c}. \quad (7.22)$$

თუ ცდას ჩავატარებთ მაგნიტური ველის სამი (ელიფსოიდის მთავარიღერძების შესაბამისი) მიმართულებისათვის გვექნება:

$$\Delta_1 = C_H \left(\frac{m_1^{*2}}{m_2^* m_3^*} \right)^{1/6} \left(\frac{M}{N} \right)^{2/3} \quad (7.23)$$

$$\Delta_2 = C_H \left(\frac{m_2^{*2}}{m_3^* m_1^*} \right)^{1/6} \left(\frac{M}{N} \right)^{2/3} \quad (7.24)$$

$$\Delta_3 = C_H \left(\frac{m_3^{*2}}{m_1^* m_2^*} \right)^{1/6} \left(\frac{M}{N} \right)^{2/3}. \quad (7.25)$$

ამ თანაფარდობათა გადამრავლებით ეკვივალენტური მინიმუმების რიცხვისათვის მივიღებთ

$$M = C_H^{-3/2} N (\Delta_1 \Delta_2 \Delta_3)^{1/2}. \quad (7.26)$$

თუ ზონის იზოენერგეტიკული ზედაპირი ბრუნვითი ელიფსოიდია, მაშინ ელიფსოიდის ბრუნვის ღერძისადმი მაგნიტური ველის ორი (პარალელური და მართობული) მიმართულებისას Δ_{\parallel} და Δ_{\perp} პერიოდების გაზომვით დაგადგენთ ანიზოტროპიის კოეფიციენტის (7.15) სიდიდეს

$$K = \left(\frac{\Delta_{\parallel}}{\Delta_{\perp}} \right)^2. \quad (7.27)$$

ამრიგად, ოსცილაციური მოვლენების ექსპერიმენტული შესწავლა კვლევის სხვა, განხილული მეთოდებისაგან გამოირჩევა მიღებული ინფორმაციის არაორდინარობით, მაგრამ ექსპერიმენტი მთელ რიგ ტექნიკურ სირთულეებთან არის დაკავშირებული.

თაზო VIII
რეკომბინაციული მოვლენები

8.1. წონასწორული და არაწონასწორული
კონცენტრაციები

კრისტალში, თერმოდინამიკური წონასწორობის პირობებში არსებულ მუხტის თავისუფალი გადამტანების კონცენტრაციას წონასწორულ კონცენტრაციას უწოდებენ (n_0, p_0), ე.ი. წონასწორული მუხტის გადამტანების რიცხვს მიეკუთვნება ის ელექტრონები და ხვრელები, რომელთა გენერაცია სითბური ენერჯის ხარჯზე მიმდინარეობს. კრისტალურ მესერთან სითბურ წონასწორობაში მყოფი ამ გადამტანების განაწილება, კვანტური მდგომარეობის მიხედვით, აიწერება განაწილების ფუნქციის მეშვეობით (თავი III), რომელსაც წონასწორული ვუწოდოთ – $f_0(E)$. ცხადია, კრისტალში გარკვეული სიდიდის n_0, p_0 კონცენტრაციების შენარჩუნება საკმაოდ რთული, დინამიური პროცესის შედეგია, რომელიც გენერაციასთან ერთად რეკომბინაციასაც (გამტარობის ელექტრონის ბმულ მდგომარეობაში დაბრუნებას და ამდენად ორი თავისუფალი გადამტანის – ელექტრონის და ხვრელის მოსპობას) მოიცავს. თერმოდინამიკური წონასწორობისას ამ ორი პროცესის მახასიათებელი G_0 და R_0 სიჩქარეები ერთმანეთს უტოლდება (G_0 – დროის ერთეულში, კრისტალის მოცულობის ერთეულში გენერირებული, ხოლო R_0 – რეკომბინირებული ელექტრონ ხვრელური წყვილების რიცხვია).

გარეშე ზემოქმედებას კრისტალი გამოყავს თერმოდინამიკური წონასწორობის მდგომარეობიდან. შედეგად იცვლება მუხტის გადამტანების განაწილება კვანტური მდგომარეობების მიხედვით (ე.ი. განაწილების ფუნქცია), შედარებით ძლიერი ზემოქმედებისას კი შეიძლება შეიცვალოს კონცენტრაციაც, ჭარბი $\Delta n, \Delta p$ კონცენტრაციები არაწონასწორულის n, p და წონასწორულის n_0, p_0 სხვაობებს წარმოადგენენ

$$\Delta n = n - n_0 . \tag{8.1}$$

$$\Delta p = p - p_0 . \tag{8.2}$$

ვინაიდან გარეშე ზემოქმედებით განპირობებულ, როგორც წესი, გაზრდილ გენერაციას თან ახლავს რეკომბინაციის პროცესის ინტენსიფიკაციაც, ამიტომ კრისტალში სწრაფად დამყარდება სტაციონალური პირობები ($\partial n / \partial t = 0$), გენერაციის და რეკომბინაციის სიჩქარეთა ტოლობის ($G = R$) აღდგენის გამო. თუ

თერმოდინამიკური წონასწორობის პირობებში რეკომბინაციის სინქარე წონასწორული კონცენტრაციების მნიშვნელობებზე იყო დამოკიდებული

$$R_0 = \gamma n_0 p_0 \quad (8.3)$$

ახალ სტაციონალურ პირობებში ის უკვე არაწონასწორული კონცენტრაციებით განისაზღვრება

$$R = \gamma n p, \quad (8.4)$$

აქ γ კონცენტრაციისაგან დამოუკიდებელი (კრისტალის თვისებების გამომხატველი) რეკომბინაციის კოეფიციენტია.

მესამე თავში ნახვენები იყო, რომ მოცემულ კრისტალში გადამტანების წონასწორული კონცენტრაცია F ფერმის ენერგიით ($\eta = (F - E_c) / k_0 T$ დაყვანილი ფერმის დონით) განისაზღვრება. არაწონასწორულ პირობებში, მუხტის გადამტანების სტატისტიკის ცნობილი თანაფარდობების ფორმალურად უცვლელი სახით შესანარჩუნებლად, ფერმის ენერგიის ნაცვლად შემოტანილია ეფექტური პარამეტრები, რომლებსაც ელექტრონის F_n^*, η_n^* და ხვრელის F_p^*, η_p^* ფერმის კვაზი ენერგიას (კვაზი დონეებს) უწოდებენ. მაშინ, მაგალითად, გადაუგვარებელი ნახევრად გამტარისათვის

$$n = \rho_c^* e^{\eta_n^*} = n_0 e^{\eta_n^* - \eta}, \quad (8.5)$$

$$p = \rho_v^* e^{\eta_p^* - \eta_g} = p_0 e^{\eta_p^* - \eta} \quad (8.6)$$

და

$$\eta_n^* = \frac{F_n^* - E_c}{k_0 T}, \quad (8.7)$$

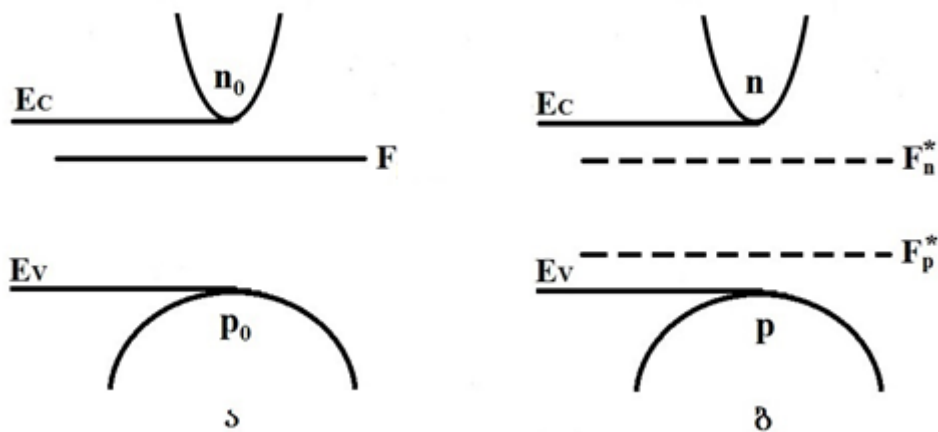
$$\eta_p^* = \frac{E_v - F_p^*}{k_0 T}. \quad (8.8)$$

აღსანიშნავია, რომ თერმოდინამიკური წონასწორობის მდგომარეობიდან გადახრის კრიტერიუმად შეიძლება გამოვიყენოთ არა მარტო ჭარბი კონცენტრაციის მნიშვნელობა (ჭარბი კონცენტრაციის ინჟექციის დონე), არამედ ფერმის დონის ეფექტურ დონეებად გახლეჩის სიდიდეც (ნახ. 8.1). მართლაც, (8.5), (8.6) გამოსახულებების გადამრავლებით

$$np = n_0 p_0 e^{\eta_n^* - \eta_p^*} \quad (8.9)$$

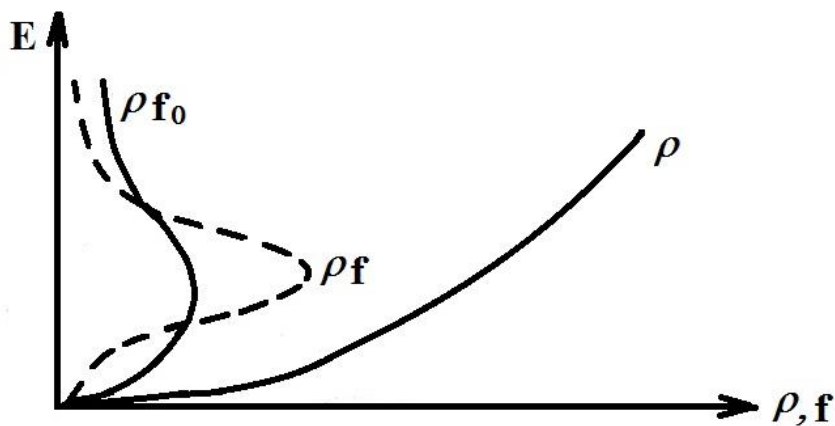
და მაშასადამე

$$F_n^* - F_p^* = k_0 T \ln \frac{np}{n_0 p_0}. \quad (8.10)$$



ნახ. 8.1. ფერმის დონის ორ ეფექტურ დონედ გახლეჩა
 ა)წონასწორული მდგომარეობა;
 ბ)არაწონასწორული მდგომარეობა

მუხტის გადამტანების ინჟექციის დაბალი დონისას, როდესაც $F_n^* \approx F_p^* \approx F$, ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის ერთიანი ფერმის დონე შეიძლება შევინარჩუნოთ, მაგრამ ამ შემთხვევაშიც არ არის გამორიცხული მნიშვნელოვანი განსხვავება არაწონასწორული მუხტის გადამტანების განაწილების ფუნქციასა $f(E)$ და $f_0(E)$ საწყის, წონასწორულს შორის. საილუსტრაციოდ ნახ. 8.2-ზე მოყვანილია გამტარობის ზონაში მდგომარეობათა სიმკვრივის და, აგრეთვე, მდგომარეობათა სიმკვრივის წონასწორულ და არაწონასწორულ განაწილების ფუნქციაზე ნამრავლებსა და ენერგიას შორის დამოკიდებულებები.



ნახ. 8.2. ელექტრონების მდგომარეობათა სიმკვრივის ρ და მისი წონასწორულ f_0 და არაწონასწორულ f განაწილების ფუნქციაზე ნამრავლების ენერგეტიკული დიაგრამა

ამავე დროს, მარტივი ანალიზის საფუძველზე, უმეტეს შემთხვევაში, შეიძლება დასაბუთდეს არაწონასწორული ელექტრონებისა და ხვრელებისათვის განაწილების ფუნქციის წონასწორული ფორმის გამოყენების შესაძლებლობა. ახლად

გენერირებული გადამტანების ენერჯია შეიძლება მნიშვნელოვნად ჭარბობდეს წონასწორული გადამტანების ენერჯიას. ეს ცხელი ელექტრონები, თუ ხვრელები განაბნევენ ჭარბ ენერჯიას - გადასცემენ მას კრისტალურ მესერს. აღმოჩნდა, რომ ამ პროცესის ხანგრძლივობა 10^{-10} წამის რიგისაა, მაშინ, როდესაც დაშვებულ ზონაში მუხტის გადამტანების სიციცხლის დრო გაცილებით დიდია - $10^{-2} - 10^{-8}$ წმ. ამდენად, ჭარბი მუხტის გადამტანებიც არსებობის დროის ძირითად ნაწილს კრისტალურ მესერთან სითბურ წონასწორობაში ატარებენ (მათი ანერჯია მესრის საშუალო სითბური ენერჯიის ტოლი ხდება). ეს კი უფლებას გვაძლევს ფერმის ენერჯიის ახალი (ეფექტური) მნიშვნელობების გამოყენებით შევინარჩუნოთ განაწილების ფუნქციის წონასწორული ფორმა.

8.2. არაწონასწორული მუხტის გადამტანების სიციცხლის დრო ბიპოლარული და მონოპოლარული გენერაციისას

რეკომბინაციის პროცესის მიმდინარეობა მჭიდრო კავშირშია მუხტის გადამტანების გენერაციის პირობებთან, ელექტრონების და ხვრელების ინჟექციის დონესთან. განვიხილოთ წონასწორული კონცენტრაციის აღდგენის პროცესი კრისტალში, რომელშიც გარეშე ზემოქმედებით გენერაცია ხორციელდება გამტარობის ზონაში ელექტრონის სავალენტო ზონიდან აღგზნებით (ბიპოლარული გენერაცია, $\Delta n = \Delta p$). ზემოქმედების შეწყვეტა რეკომბინაცია - გენერაციის სიჩქარეთა ტოლობას დაარღვევს. ვინაიდან რეკომბინაციის სიჩქარეს არაწონასწორული კონცენტრაცია, ხოლო გენერაციისას - წონასწორული კონცენტრაცია განსაზღვრავს, ამიტომ რეკომბინაციის სიჩქარე გადააჭარბებს გენერაციის სიჩქარეს

$$-\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial t} = \gamma n p - G_0, \quad (8.11)$$

(8.3) და $R_0 = G_0$ გათვალისწინებით მივიღებთ

$$-\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma (n p - n_0 p_0) + \gamma (n_0 + p_0 + \Delta n) \Delta n. \quad (8.12)$$

გავანალიზოთ (8.12) ჯერ სუსტი ბიპოლარული გენერაციისას, როდესაც $\Delta n \ll (n_0 + p_0)$, მაშინ

$$-\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma (n_0 + p_0) \Delta n = \gamma (n_0 + p_0) (n - n_0). \quad (8.13)$$

$\gamma(n_0 + p_0)$ განსაზღვრავს კრისტალის მოცულობის ერთეულში, დროის ერთეულში ერთი თავისუფალი მუხტის გადამტანის რეკომბინაციის ალბათობას. აღნიშნოთ ეს ნამრავლი $1/\tau$ და გამოვიყენოთ (8.13)-ში, გვექნება

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{n-n_0}{\tau} = \frac{\Delta n}{\tau}. \quad (8.14)$$

ამ თანაფარდობით მარტივად მიიღება გამოსახულება, რომელიც საშუალებას მოგვცემს განვსაზღვროთ ჭარბი კონცენტრაცია დროის ნებისმიერი მომენტისათვის, თუ ცნობილია მისი სიდიდე გარეშე ზემოქმედების შეწყვეტის მომენტში ($t=0$)

$$\Delta n(t) = \Delta n(0)e^{-t/\tau} \quad (8.15)$$

რელაქსაციის პროცესის მახასიათებელ τ სიდიდეს, რომელიც დროის იმ შუალედს განსაზღვრავს, რომლის განმავლობაშიც მუხტის გადამტანების ჭარბი კონცენტრაცია (e) ნეპერის რიცხვჯერ მცირდება, არაწონასწორული მუხტის გადამტანების რელაქსაციურ სიციცხლის დროს (ან უბრალოდ სიციცხლის დროს) უწოდებენ. τ ჭარბი კონცენტრაციის არსებობის საშუალო დროს წარმოადგენს. ბიპოლარული გენერაციისას ეს დრო ერთნაირია როგორც ელექტრონებისათვის, ასევე ხვრელებისათვის ($\tau = \tau_n = \tau_p$) და სხვადასხვა ნახევრად გამტარში $10^{-2} - 10^{-8}$ წმ შეადგენს.

ძლიერი ბიპოლარული გენერაციისას, როდესაც $\Delta n \gg (n_0 + p_0)$ (8.12) შემდეგნაირად შეიძლება გადაიწეროს:

$$-\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma \Delta n^2. \quad (8.16)$$

ამ განტოლების შესაბამისად კი

$$\Delta n(t) = \frac{\Delta n(0)}{1 + \gamma t \Delta n(0)}. \quad (8.17)$$

რელაქსაციური პროცესი აღარ აიწერება ექსპონენციალური კანონით (მას ჰიპერბოლური კანონი შეესაბამება, თუმცა, როდესაც ჭარბი კონცენტრაცია იმდენად შემცირდება, რომ $\Delta n \gg n_0$ პირობა დაირღვევა, ის გადავა ექსპონენციალურში) და სიციცხლის τ დროისათვის მხოლოდ მყის მნიშვნელობას აქვს აზრი, ვინაიდან ის არაწონასწორული კონცენტრაციით განისაზღვრება

$$\tau(t) = \frac{1}{\gamma \Delta n(t)}. \quad (8.18)$$

თუ გარეშე ზემოქმედებით კრისტალში ჩნდება მხოლოდ ერთი ტიპის დამატებითი მუხტის გადამტანი (დონორის იონიზაცია p ტიპის ნახევრად გამტარში), მაშინ გენერაციას მონოპოლარული ეწოდება. კრისტალის გარკვეულ არეში მუხ-

ტის ძირითადი გადამტანების ჭარბი კონცენტრაციის შექმნა განაპირობებს მათ დიფუზიას კრისტალის წონასწორული კონცენტრაციის უბნებისაკენ. ელექტრონეიტრალობის პირობა ირღვევა, ყალიბდება სივრცული მუხტი და შიგა ელექტრული ველი. გარეშე ზემოქმედების შეწყვეტის შემდეგ, სწორედ ეს ველი განაპირობებს მუხტის გადამტანების დრეიფს და უზრუნველყოფს სივრცული მუხტის მოსპობას. ამ რელაქსაციური პროცესის სიჩქარე კრისტალის ელექტროგამტარობაზე და დიელექტრიკულ შეღწევადობაზეა დამოკიდებული

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\sigma}{\epsilon \epsilon_0} \rho(0). \quad (8.19)$$

აქ ρ სივრცული მუხტის სიმკვრივეა, რომლის მყისი მნიშვნელობა (8.19)-ის შესაბამისად შემდეგნაირად განისაზღვრება:

$$\rho(t) = \rho(0)e^{-t/\tau_m}. \quad (8.20)$$

მონოპოლური გენერაციისას არაწონასწორული მუხტის გადამტანების რელაქსაციურ სიციცხლის დროს τ_m დიელექტრიკულ ან მაქსველის რელაქსაციურ დროს უწოდებენ

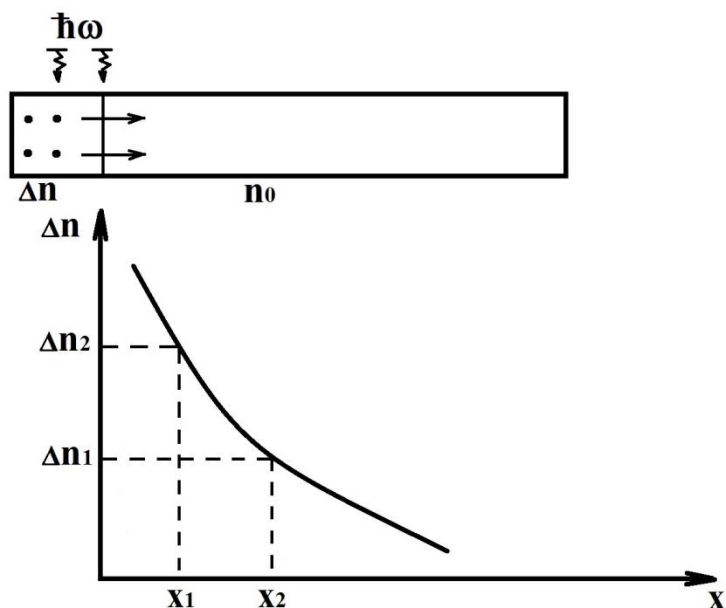
$$\tau_m = \frac{\epsilon \epsilon_0}{\sigma}. \quad (8.21)$$

მაქსველის რელაქსაციის დრო ნახევრად გამტარში $10^{-12} - 10^{-13}$ წამს შეადგენს.

8.3. მუხტის გადამტანების დიფუზიური სიგრძე

დაუზღვრებლად კრისტალში არაწონასწორული კონცენტრაციის ლოკალური არის შექმნის შედეგად ჭარბი მუხტის გადამტანების წონასწორულ კონცენტრაცი-ათა არეში დიფუზიის პროცესს. მის დასახასიათებლად რამდენიმე მნიშვნელოვანი პარამეტრი იქნება შემოტანილი. მაგალითისთვის განვიხილოთ n ტიპის გადაუგვარებელი ნახევრად გამტარი, რომლის ერთ-ერთი კიდის მახლობელ ფენებში ჭარბი კონცენტრაცია იქნება შესაბამისი სიხშირის სინათლის დასხივებით (ნახ. 8.3). განათებული არიდან ნაწილაკების ნაკადი პროპორციული იქნება კონცენტრაციის გრადიენტის და პროცესი შეიძლება აიწეროს დიფუზიური დენის ცნების გამოყენებით

$$J_D = -D_n e \nabla n. \quad (8.22)$$



ნახ. 8.3. გენერირებული ჭარბი ელექტრონების განაწილება კრისტალის წონასწორული კონცენტრაციის არეში

პროპორციულობის D_n კოეფიციენტს დიფუზიის კოეფიციენტს უწოდებენ. აინშაინის თანაფარდობა ამყარებს კავშირს დიფუზიის კოეფიციენტსა და მუხტის გადამტანების ძვრადობას შორის

$$D_n = \frac{k}{e} T \mu_n. \quad (8.23)$$

კრისტალის გაუნათებელ არეში დიფუნდირებული ჭარბი გადამტანების კონცენტრაცია x სიღრმეზე ექსპონენციალური კანონით არის დამოკიდებული

$$\Delta n = \Delta n(0) e^{-x/l_D} \quad (8.24)$$

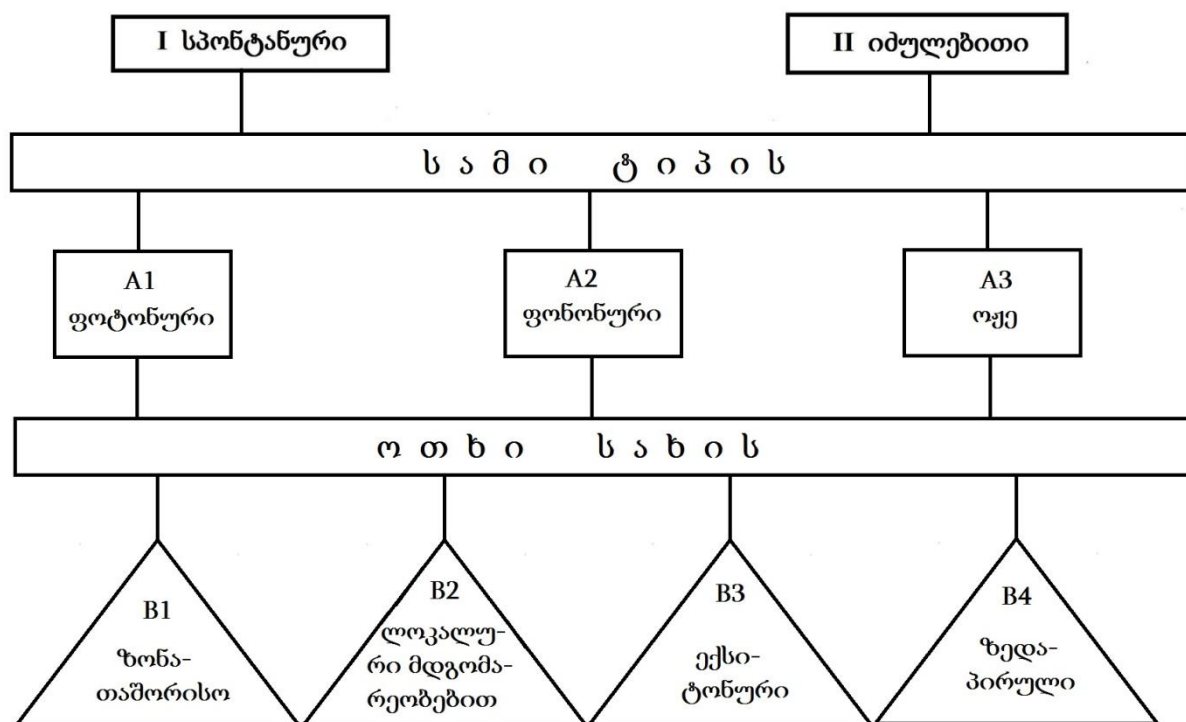
l_D მუხტის გადამტანების დიფუზური სიგრძეს უწოდებენ. ის განსაზღვრავს მანძილს, რომელზეც ჭარბი კონცენტრაცია ნეპერის რიცხვჯერ მცირდება (ნახ. 8.3-ზე $\Delta n_1/\Delta n_2 = e$ და $l_D = x_2 - x_1$). რაც მეტია არაწონასწორული მუხტის გადამტანების სიციცხლის დრო და დიფუზიის კოეფიციენტი, მით უკეთესი პირობები იქნება დიფუზიისათვის და იზრდება დიფუზური სიგრძე

$$l_D = \sqrt{\tau_n D_n}. \quad (8.25)$$

ცხადია (8.22) - (8.25)-ის ანალიგიური გამოსახულებები გვექნება p ტიპის ნახევრად გამტარებშიც. მაგალითად, $p-Ge$ -ში დიფუზიური სიგრძე შეადგენს 0,7მმ.

8.4. რეკომბინაციის ძირითადი მექანიზმები

რეკომბინაციის პროცესების, ამ პროცესებთან დაკავშირებული ეფექტების მრავალსახეობის გათვალისწინებით, თვალსაჩინოებისათვის მიზანშეწონილია რეკომბინაციის კლასიფიკაციური სქემის ჩამოყალიბება (ნახ. 8.4). კლასიფიკაციას, როგორც წესი, საფუძვლად უდევს სამი მოსაზრება: პროცესის აღძვრის მიზეზი, განხორციელების მექანიზმი და ის, თუ რას მოხმარდება რეკომბინაციის დროს გამონათავისუფლებული ენერგია.

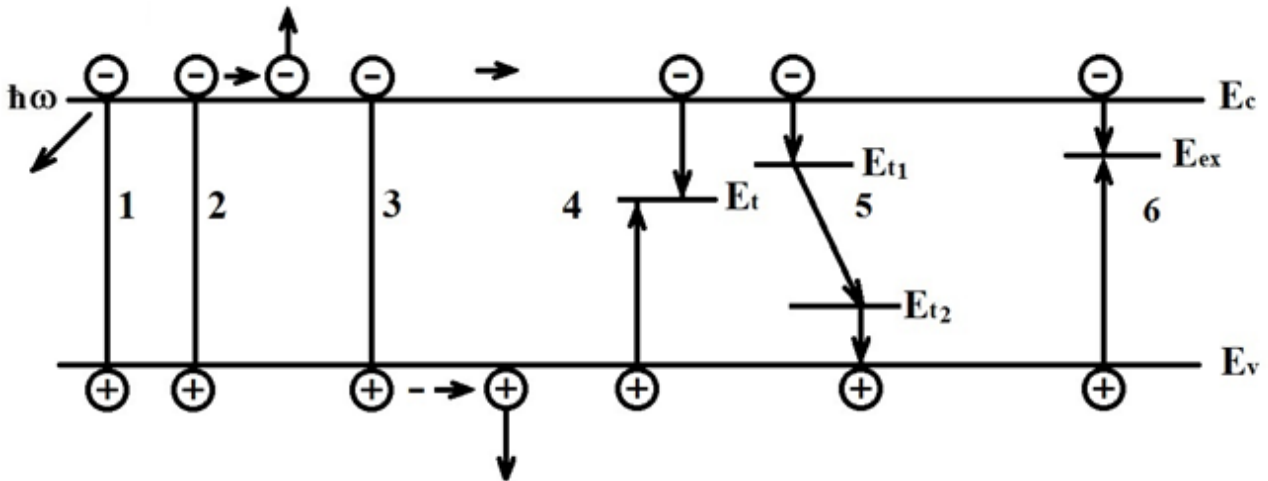


ნახ. 8.4. რეკომბინაციის კლასიფიკაციის სქემა

რეკომბინაცია სპონტანურია (I გვარის), თუ ის თავისთავად აღიძვრება და მიმდინარეობს, ხოლო იძულებითია (II გვარის) - თუ მის განხორციელებას გარეშე ბიძგი სჭირდება. რეკომბინაცია გამოსხივებადი, ფოტონურია (მას ლუმინესცენციასაც უწოდებენ), თუ რეკომბინაციისას გამონათავისუფლებული ენერგია გამოიყოფა კრისტალიდან ფოტონების ნაკადის სახით (A1). თუ ეს ენერგია არ გამოსხივდება და კრისტალურ მესერს გადაეცემა, მაშინ რეკომბინაცია ფონონურია (A2). გამონათავისუფლებული ენერგია შეიძლება სხვა თავისუფალი მუხტის გადამტანის ენერგიის ზრდაზე (გაცხელებაზე) დაიხარჯოს. ასეთ რეკომბინაციას ოქე რეკომბინაციას უწოდებენ (A3). ცხადია, “ცხელი” მუხტის გადამტანი გაბნევის პროცესის შედეგად თავის ჭარბ ენერგიას საბოლოოდ მაინც კრისტალურ მესერს გადასცემს.

რეკომბინაციის (სამივე ტიპის) პროცესში ჩაბმული ენერგეტიკული მდგომარეობების მიხედვით ანსხვავებენ რეკომბინაციის 4 სახეს (ნახ. 8.4 და 8.5)

თუ რეკომბინაცია ელექტრონის და ხვრელის უშუალო შეხვედრის შედეგად წარმართა, მაშინ მას ზონათაშორისო ეწოდება. ნახ. 8.5-ზე სქემატურად ნაჩვენებია ზონათაშორისო რეკომბინაცია ლუმინესცენციით (1) და ოქე რეკომბინაცია ელექტრონის (2) და ხვრელის (3) “გაცხელებით”.



ნახ. 8.5. რეკომბინაციის მექანიზმის განმსაზღვრელი ელექტრონული გადასვლების სქემა (1- $A1, B1$; 2,3- $A3, B1$; 4,5- $A2, B2$; 6- $A2, B3$)

რეკომბინაციის ზონათაშორისო მექანიზმი განმსაზღვრელია შედარებით მცირე აკრძალული ზონის სიგანის ($\Delta E_g < 0,3$ ევ) ნახევრად გამტარებში. თუ $\Delta E_g > 0,5$ ევ-ზე, მაშინ პროცესში მონაწილეობენ ლოკალურ მდგომარეობაში მყოფი მინარევებით შექმნილი მდგომარეობები (თუმცა, შესაძლებელია სხვა ტიპის დეფექტების წვლილიც - მესრის საკუთარი წერტილოვანი დეფექტები, დისლოკაციები და სხვა) რეკომბინაციის პროცესში მონაწილე აღნიშნულ ცენტრებს - რეკომბინაციულ ცენტრებს, ხოლო მათ ენერგეტიკულ დონეს - საჭერ დონეს უწოდებენ. ნახ. 8.5-ით წარმოდგენილია რეკომბინაციის სქემა E_t ენერჯიის ერთი საჭერი დონის მონაწილეობით. ნეიტრალურ მდგომარეობაში მყოფი დეფექტი ჩაიჭერს ელექტრონს, დაიმუხტება უარყოფითად და კულონური ურთიერთქმედების ხელშეწყობით შემდგომ ჩაიჭერს ხვრელსაც (დააბრუნებს ჩაჭერილ ელექტრონს სავალენტო ზონაში). შესაძლებელია პირველ ეტაპზე ორივე ნიშნის მუხტის გადამტანების ჩაჭერა სხვადასხვა ცენტრზე - ელექტრონისა E_{t1} დონეზე, ხვრელისა - E_{t2} დონეზე შემდგომი რეკომბინაციით, როდესაც ორივე მუხტის გადამტანი ერთ-ერთ ცენტრზე შეხვდება ერთმანეთს (ნახ. 8.5-5).

მუხტის გადამტანების რეკომბინაციას შეიძლება წინ უძღოდეს ექსიტონის ჩამოყალიბება – გამტარობის ელექტრონი ჯერ ქმნის ხვრელთან ბმულ წყვილს, ჩაიჭირება რა ექსიტონურ დონეზე, ხოლო შემდგომ ადგილი აქვს რეკომბინაციას, ანუ ექსიტონის ანიჰილაციას (ნახ. 8.5-6).

რეკომბინაციის ყველა განხილული მექანიზმი მოქმედებს არა მარტო კრისტალის მოცულობაში, არამედ მის ზედაპირზეც. ამავე დროს, ვინაიდან კრისტალის ზედაპირი მოცულობასთან შედარებით გაცილებით მეტ დეფექტს (როგორც რაოდენობის, ასევე ნაირსახეობის მიხედვით) შეიცავს, რეკომბინაცია აქ გაცილებით უფრო ინტენსიურად მიმდინარეობს. ამის გამო დასაშვებია ზედაპირული რეკომბინაციის ცალკე კლასად გამოყოფა კლასიფიკაციურ სქემაზე (ნახ. 8.4).

კრისტალში რეკომბინაციის რამდენიმე მექანიზმის ერთდროულად მოქმედებისას, რეკომბინაციის ალბათობა და მუხტის გადამტანების საშუალო სივრცის დრო თითოეული მექანიზმისათვის დამახასიათებელი პარამეტრების ჯამით განისაზღვრება

$$W_r = \sum_i W_{ri} = \sum_i N_{ii} \sigma_{ri} \langle V_{0i} \rangle, \quad (8.26)$$

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} = \sum_i \frac{1}{N_{ii} \sigma_{ri} \langle V_{0i} \rangle}. \quad (8.27)$$

(8.26) და (8.27) თანაფარდობებში N_{ii} რომელიმე ერთი ტიპის რეკომბინაციური ცენტრების კონცენტრაციაა, $\langle V_{0i} \rangle$ - მუხტის გადამტანების საშუალო სითბური სინქარეა, σ_{ri} - კოეფიციენტი, რომელიც მუხტის გადამტანების ერთი წყვილის, მოცემული ტიპის ერთ ცენტრზე რეკომბინაციის ალბათობას განსაზღვრავს. ამ კოეფიციენტის განზომილება ფართობის განზომილებას ემთხვევა და ის რეკომბინაციული პროცესის ეფექტური კვეთის სახელწოდებას ატარებს.

ლოკალურ მდომარეობებზე მუხტის გადამტანის ჩაჭერა ყოველთვის რეკომბინაციით არ დასრულდება. თუ, მაგალითად, საჭერი დონე თხელია (დაშვებული ზონის ექსტრემუმის მახლობლად არის განლაგებული), მაშინ სითბური ენერჯის ხარჯზე შესაძლებელი ხდება მუხტის გადამტანის რეაქტივაცია (ან ჩაჭერილი ელექტრონის დაბრუნება გამტარობის ზონაში, ან ჩაჭერილი ხვრელის - სავალენტო ზონაში). ამ შემთხვევაში დეფექტს - მიწებების ცენტრს, ხოლო მის E_i - ლოკალურ დონეს - მიწებების საჭერ დონეს უწოდებენ.

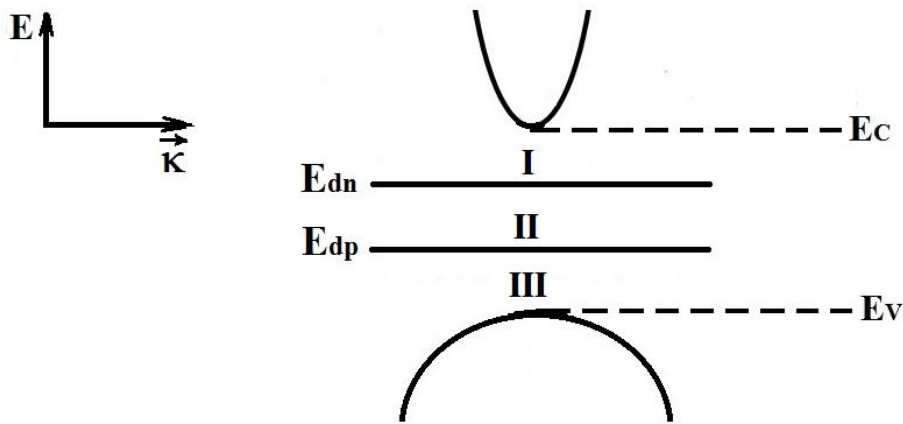
იმისათვის, რომ შეფასდეს მუხტის ძირითადი გადამტანებისათვის ამა თუ იმ საჭერი დონის როლი (რეკომბინაციულია ის, თუ - მიწებების) შემოტანილია მისი

მასხასიათებელი პარამეტრი, რომელიც დონის ენერგეტიკულ მდგომარეობასა და არაძირითადი მუხტის გადამტანების კონცენტრაციაზეა დამოკიდებული

$$K_n = \gamma_p P \left[\gamma_n \rho_c^* \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_0 T}\right) \right]^{-1}, \quad (8.28)$$

$$K_p = \gamma_n n \left[\gamma_p \rho_v^* \exp\left(\frac{E_v - E_t}{k_0 T}\right) \right]^{-1}. \quad (8.29)$$

საჭერი დონე რეკომბინაციულია, თუ $K > 1$ და მიწებების, თუ - $K < 1$. თუ $K = 1$, მაშინ საჭერ დონეს დემარკაციული (სასაზღვრო) ეწოდება. სწორედ დემარკაციული E_d დონის მიმართ საჭერი დონის განლაგების მიხედვით გამოაშკარავდება - ხელს შეუწყობს ის რეკომბინაციას, თუ პირიქით - მუხტის გადამტანის ჩაჭერით და შემდგომ დაშვებულ ზონაში დაბრუნებით გაზრდის მის სიცოცხლის დროს.



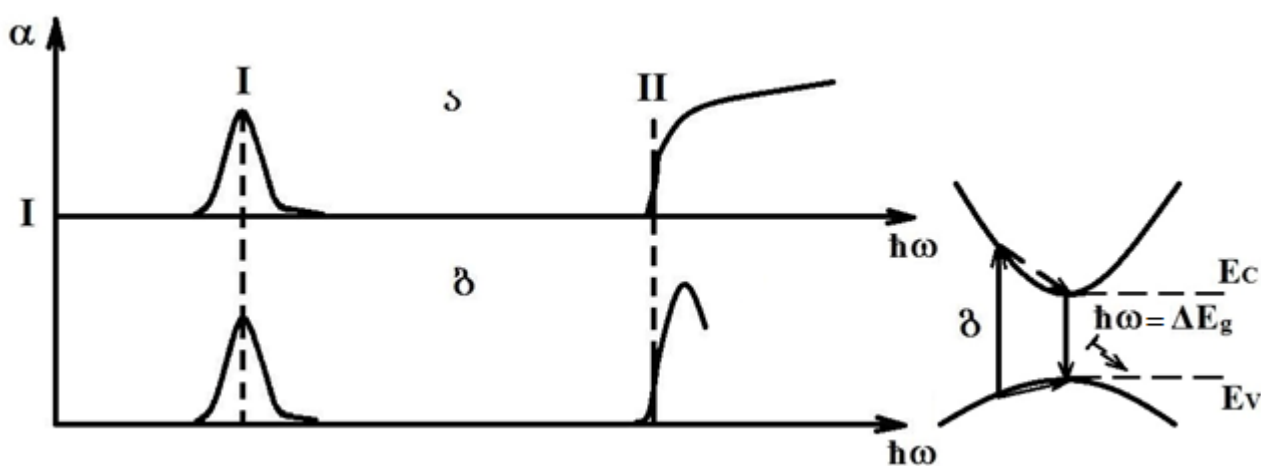
ნახ. 8.6. საჭერი დონის როლის საილუსტრაციოდ, დემარკაციული დონეებით აკრძალული ზონის დაყოფის სქემა. E_{dn} - დემარკაციული დონე ელექტრონებისათვის ($K_n = 1$), E_{dp} - ხვრელებისათვის ($K_p = 1$)

საჭერი დონე მიწებებისაა ელექტრონებისათვის, თუ განლაგდება გამტარობის ზონასა და ელექტრონებისათვის განსაზღვრულ დემარკაციულ დონეს შორის (I არე ნახ. 8.6-ზე). საჭერი დონე მიწებებისაა ხვრელებისათვის, თუ მოთავსდა ხვრელებისათვის განსაზღვრული დემარკაციულ დონესა და სავალენტო ზონას შორის (III არე ნახ. 8.6-ზე). ყველა სხვა შემთხვევაში საჭერი დონე რეკომბინაციულია.

8.5. ლუმინესცენცია ნახევრად გამტარში

ზემოთ განხილულ რეკომბინაციის სამ შესაძლო ტიპს შორის უაღრესად მნიშვნელოვანია - პრაქტიკული გამოყენების და მეთოდური თვალსაზრისით - ლუმინესცენცია. იმის და მიხედვით, თუ კრისტალს რა გზით მიეწოდა მუხტის თავისუფალი გადამტანების გენერაციისათვის საჭირო ენერგია, ანსხვავებენ გამოსხივებადი რეკომბინაციის ოთხ სახეს: ელექტროლუმინესცენციას, ფოტოლუმინესცენციას, კათოდოლუმინესცენციას და რადიოაქტიურ ლუმინესცენციას (გენერაცია განპირობებულია, შესაბამისად, ელექტრული ველით, ოპტიკური დიაპაზონის ელექტრომაგნიტური გამოსხივებით, სწრაფი დამუხტული ნაწილაკებით ბომბარდირებით და რადიოაქტიური გამოსხივებით).

რეკომბინაციის შესაძლო მექანიზმების გათვალისწინებით ლუმინესცენცია შეიძლება გამოვლინდეს სპექტრის როგორც საკუთარ, ასევე მინარეულ არეში. თუ მინარეულ არეში ლუმინესცენციის ინტენსივობის და შთანთქმის კოეფიციენტების სპექტრული დამოკიდებულებები ერთმანეთის ანალოგიურია (ნახ. 8.7), ზონათაშორისო გადასვლების არეში, როდესაც $h\omega > \Delta E_g$, შთანთქმის კოეფიციენტის ზრდის ფონზე ვლინდება გამოსხივების ინტენსივობის მნიშვნელოვანი შესუსტება.



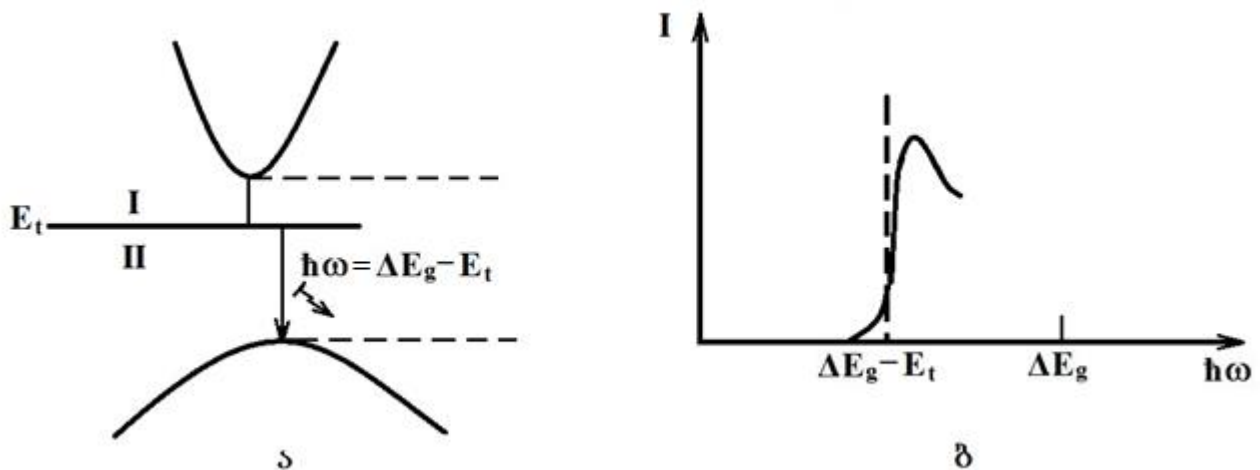
ნახ. 8.7. შთანთქმის (ა) და ლუმინესცენციის (ბ) სპექტრები მინარეულ (I) და საკუთარ (II) არეებში. (გ) - ზონათაშორისო ლუმინესცენციის სქემატური ინტერპრეტაცია

მოკლევადლოვან უბანში ლუმინესცენციის ეს თავისებურება იმით აიხსნება, რომ გენერაციისას შედარებით მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში აღგზნებული მუხტის თავისუფალი გადამტანი, თავისი სიცოცხლის დროის განმავლობაში ასწრებს 1 - 3 გაბნევის აქტის განხორციელებას. ამის გამო, მისი ენერგია ზონების

აბსოლუტური ექსტრემუმების შესაბამისი ხდება (ნახ. 8.7,ვ) და, ამდენად, უშუალოდ რეკომბინაციისას გამოსხივდება პრაქტიკულად მაინც ΔE_g -ს ტოლი ენერჯიის კვანტი.

ლუმინესცენციის ზონათაშორისო მექანიზმთან შედარებით, გაცილებით უფრო ალბათურია მისი წარმართვა ლოკალური დონის მონაწილეობით. ამ შემთხვევაში გამოსხივებული ფოტონის ენერჯია ΔE_g -ზე ნაკლები იქნება, ვინაიდან გადასვლების ერთ-ერთ საფეხურზე (ნახ. 8.8-ის I ეტაპზე), როგორც წესი, გამოსხივებას ადგილი არა აქვს და გამონთავისუფლებული ენერჯია კრისტალურ მესერს გადაეცემა.

ლუმინესცენციის პროცესში მონაწილე მუხტის გადამტანის სიცოცხლის დრო, ისევე, როგორც საერთოდ რეკომბინაციის მახასიათებელი რელაქსაციის დრო, კრისტალის მრავალ პარამეტრზეა დამოკიდებული. ამ მხრივ, განსაკუთრებით მნიშვნელოვანია τ -ს დამოკიდებულება ფერმის დონის მდებარეობასა და ტემპერატურაზე.



ნახ. 8.8. ლუმინესცენცია ლოკალური დონის მონაწილეობით. გადასვლების სქემა (ა) და სპექტრი (ბ)

8.6. მუხტის გადამტანების სიცოცხლის დროის დამოკიდებულება ფერმის დონის მდებარეობასა და ტემპერატურაზე

როგორც ვნახეთ, მუხტის გადამტანის სიცოცხლის დრო ნახევრად გამტარის კონკრეტული მდგომარეობის მახასიათებელ მრავალ პარამეტრზეა დამოკიდებული: 1) მუხტის გადამტანების წონასწორულ კონცენტრაციაზე (და ამდენად ლევირების ხარისხზე); 2) რეკომბინაციული ცენტრების ტიპზე, კონცენტრაციაზე და ენერჯე-

ტიკულ მდგომარეობაზე; 3) მუხტის გადამტანების ჭარბ კონცენტრაციაზე; 4) ტემპერატურაზე და ა.შ. ყველა ამ ფაქტორის გათვალისწინებით რელაქსაციის დრო ასეთი გამოსახულებით შეიძლება იყოს წარმოდგენილი (ჰოლ-შოკლი-რიდის მოდელი);

$$\tau = \frac{n_0 + n_1 + \Delta n}{\gamma_p N_t (n_0 + p_0 + \Delta n)} + \frac{p_0 + p_1 + \Delta p}{\gamma_n N_t (n_0 + p_0 + \Delta n)}, \quad (8.30)$$

აქ

$$n_1 = \rho_c^* \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}\right), \quad (8.31)$$

$$p_1 = \rho_v^* \exp\left(\frac{E_v - E_t}{k_0 T}\right). \quad (8.32)$$

შესაბამისად გამატარობის და სავალენტო ზონებში მუხტის გადამტანთა წონასწორული კონცენტრაციებია იმ შემთხვევისათვის, როდესაც ფერმის დონე საჭერ დონეს ემთხვევა. თუ შემოვიფარგლებით სუსტი გენერაციით ($\Delta p = \Delta n \ll n_0 + p_0$), მაშინ

$$\tau = \tau_{p0} \frac{n_0 + n_1}{n_0 + p_0} + \tau_{n0} \frac{p_0 + p_1}{n_0 + p_0}, \quad (8.33)$$

სადაც

$$\tau_{p0} = \frac{1}{\gamma_p N_t} \quad (8.34)$$

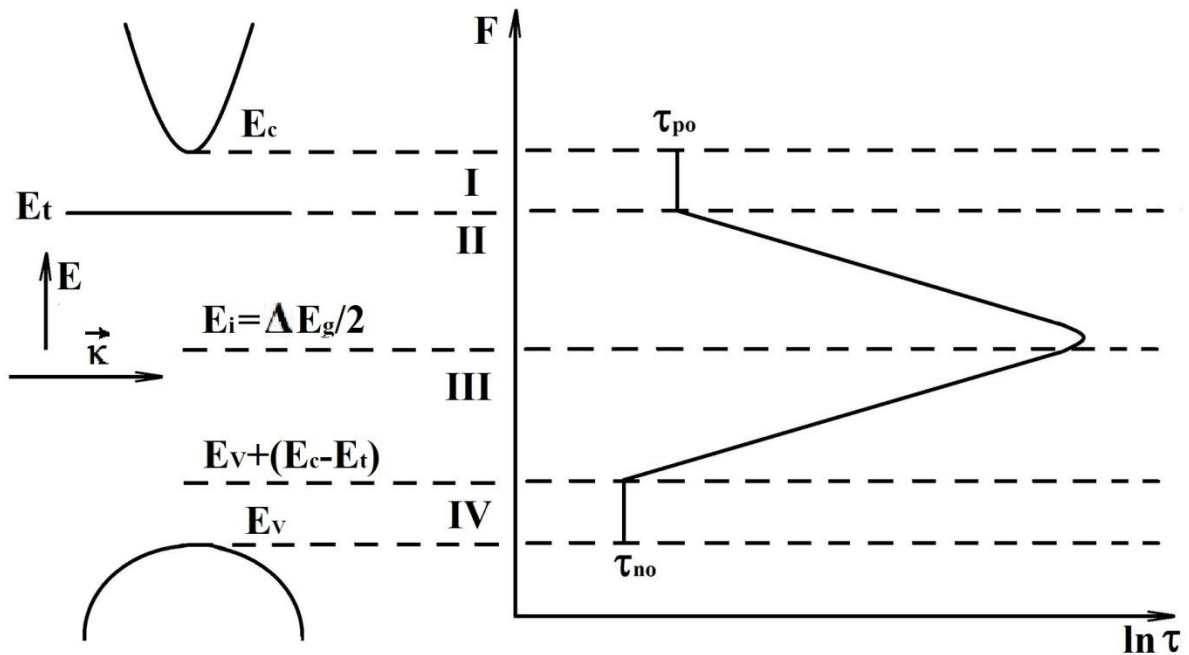
$$\tau_{n0} = \frac{1}{\gamma_n N_t}. \quad (8.35)$$

განსაზღვრავენ ხვრელების ან ელექტრონების სიცოცხლის დროს საჭერ დონეზე მათ ჩაჭერამდე (შესაბამისად ხვრელებისაგან ან ელექტრონებისაგან მთლიანად თავისუფალი საჭერი დონისას).

(8.33) საშუალებას გვაძლევს დავადგინოთ საჭერი დონის და ფერმის დონის ურთიერთგანლაგების გავლენა τ -ს მნიშვნელობაზე. ამისათვის, აკრძალული ზონა დავყოთ ოთხ უბნად და ანალიზი ჩავატაროთ თითოეული უბნისათვის ცალ-ცალკე (ნახ. 8.9).

I უბანი - ფერმის დონე გამტარობის ზონის ძირსა და საჭერ დონეს შორის არის განლაგებული. ნახევრად გამტარი n ტიპისაა, საჭერი დონე პრაქტიკულად მთლიანად არის ელექტრონებით შევსებული და მათი კონცენტრაცია ამ დონეზე მუდმივია ($n_t = const, n_0 \gg p_0, n_0 \gg n_1, n_0 \gg p_1$). ხვრელის ჩაჭერა ელექტრონებით მთლიანად დაკავებულ E_t მდგომარეობებზე ყოველთვის რეკომბინაციით დაგვირგვინდება და რელაქსაციის დრო მხოლოდ ხვრელის ჩაჭერის ალბათობით

განისაზღვრება. მართლაც, მითითებული პირობების გათვალისწინებით (8.33) უმარტივეს $\tau = \tau_{p0} = const$ გამოსახულებამდე დავა.



ნახ. 8.9. მუხტის გადამტანის სიცოცხლის დროის დამოკიდებულება ფერმის ენერგიაზე

II უბანი - ფერმის დონე საჭერ დონეზე დაბლა დევს ($E_t < F < E_i$), სუსტად ლეგირებული n ტიპის ნახევრად გამტარია ($n_0 \gg p_0$). საჭერ დონეზე არსებული მდგომარეობების ნაწილი არ არის დაკავებული ელექტრონებით ($n_1 > n_0$, $p_1 \gg p_0$ და $n_1 \gg p_1$). რეკომბინაციის ალბათობა მცირდება რეკომბინაციის ცენტრებზე ელექტრონების რიცხვის შემცირების შედეგად, ე.ი. იზრდება მუხტის ძირითადი გადამტანების სიცოცხლის დრო

$$\tau = \tau_{p0} \left(\frac{n_1}{n_0} \right), \quad (8.36)$$

თუ წონასწორული n_0 კონცენტრაციისათვის ბოლცმანის განაწილებას გამოვიყენებთ (თავი VII) და გავითვალისწინებთ (8.31) მივიღებთ, რომ ფერმის დონის დაწვევისას სიცოცხლის დრო ექსპონენციალური კანონით იზრდება

$$\tau = \tau_{p0} \exp\left(\frac{E_t - F}{k_0 T} \right). \quad (8.37)$$

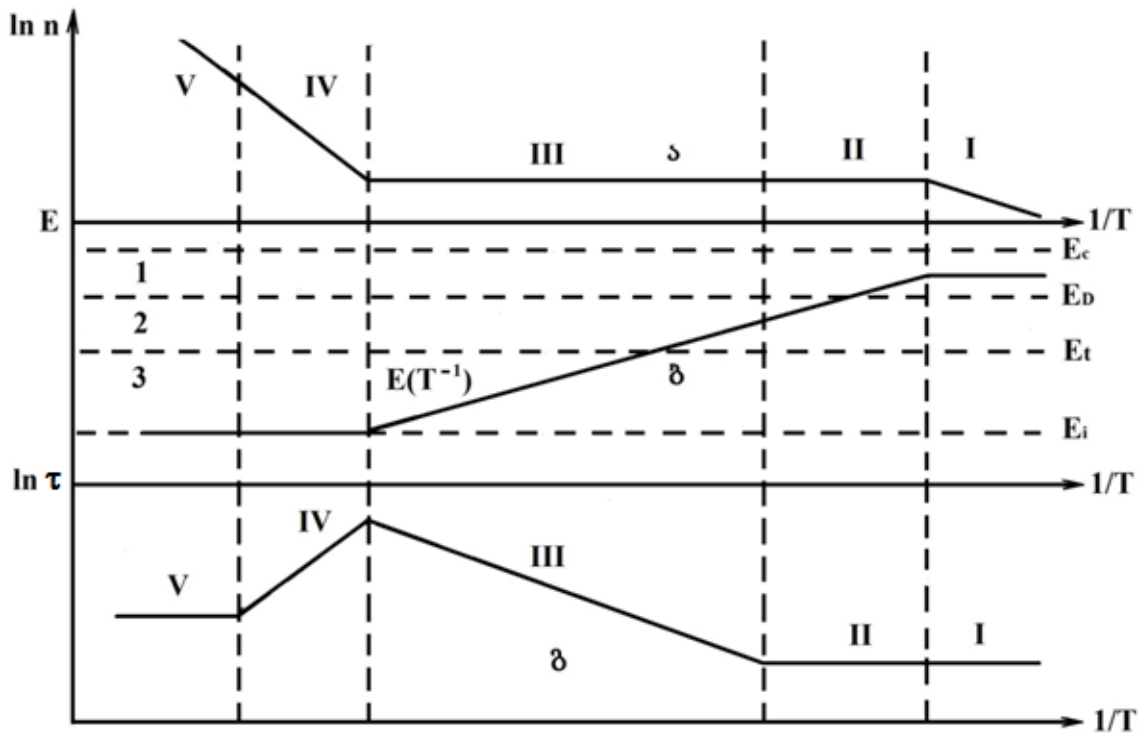
III უბანი სუსტად ლეგირებული p ტიპის ნახევრად გამტარს შეესაბამება ($p_0 \gg n_0$, $p_0 \gg p_1$, $n_1 \gg n_0$), მაშინ

$$\tau = \tau_{p0} \frac{n_1}{p_0} + \tau_{n0} = \tau_{p0} \exp\left(-\frac{E_c - E_t + E_v - F}{k_0 T}\right) + \tau_{n0} \quad (8.38)$$

სიცოცხლის დრომ მაქსიმუმს მიაღწია, როდესაც ფერმის დონემ აკრძალული ზონის შუაზე გაიარა. ამის შემდგომ τ მცირდება, ვინაიდან დაცარიელებულ საჭერ დონეზე ჩატერილი ელექტრონის რეკომბინაცია მით უფრო ალბათური იქნება, რაც უფრო გაიზრდება კრისტალში ხვრელების კონცენტრაცია ფერმის დონის შემდგომი დაწვევისას.

როდესაც ფერმის დონე IV უბანში განლაგდება, საჭერ დონეზე ყველა მდგომარეობა ხვრელებით არის დაკავებული ($n_t = 0$). რეკომბინაციის ალბათობა საჭერ დონეზე მხოლოდ ელექტრონების ჩატერაზეა დამოკიდებული (p ტიპის ნახევრად გამტარი, $p_0 \gg n_0$, $p_0 \gg p_1$, $p_0 \gg n_1$). რელაქსაციის დრო, I უბნის ანალოგიურად, აღარ არის დამოკიდებული ფერმის დონის მდებარეობაზე $\tau = \tau_{n0} = const$.

მუხტის გადამტანების სიცოცხლის დროის ტემპერატურაზე დამოკიდებულების შესასწავლად განვიხილოთ n ტიპის ნახევრად გამტარი, რომლის აკრძალული ზონის ზედა ნახევარი დავეოთ სამ ინტერვალად: 1 – გამტარობის ზონის ძირიდან დონორულ დონემდე ($E_c - E_D$); 2 – დონორულ და საჭერ დონეებს შორის ($E_D - E_t$); 3 – საჭერი დონიდან აკრძალული ზონის შუამდე ($E_t - E_i$). ნახ. 8.10.-ზე თავმოყრილია ფერმის დონის მდებარეობის, სიცოცხლეს დროის და კონცენტრაციის ლოგარითმების დამოკიდებულებები შებრუნებულ ტემპერატურაზე. აღნიშნული პარამეტრების ტემპერატურული დამოკიდებულება შეიძლება დაიყოს ხუთ უბნად:



ნახ. 8.10. მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის (ა), ფერმის დონის (ბ) და სიციცხლის დროის (გ) ტემპერატურული დამოკიდებულებები

I – ფერმის დონე დონორულ დონეზე მაღლა დევს. სითბური ენერჯის ხარჯზე მიმდინარეობს დონორული ცენტრების იონიზაცია, გამტარობის ზონაში მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია იზრდება. ამავე დროს, საჭერ დონეზე ყველა მდგომარეობა ელექტრონებით დაკავებული რჩება, რის გამოც, ის არ ახდენს გავლენას მუხტის გადამტანების რელაქსაციის დროზე და $\tau = const$.

II – თუმცა ფერმის დონემ გადაკვეთა დონორული დონე, იგი ჯერ კიდევ საჭერ დონეზე მაღლაა. შედეგად – დონორული დონე პრაქტიკულად დაცარიელებულია, საჭერი დონე კი კვლავ შევსებული. მუხტის გადამტანების სიციცხლის დროსთან ერთად ტემპერატურაზე დამოკიდებული ხდება კონცენტრაციაც.

III – ფერმის დონე საჭერ დონესაც გასცდა. საჭერი დონე თავისუფლდება, რის გამოც შესაძლებელი ხდება ამ ცენტრებზე გამტარობის ელექტრონები ჩაჭერა, მაგრამ ვინაიდან კრისტალში ხვრელები პრაქტიკულად არ მოიძებნება, რეკომბინაციის ალბათობა მცირეა და, ამდენად, ადგილი აქვს სიციცხლის დროის ზრდას. საჭერი დონიდან გასანთავისუფლებელი ელექტრონების რიცხვის სიმცირის გამო გამტარობის ზონაში ელექტრონების კონცენტრაციაც შეიძლება მუდმივად ჩაითვალოს.

IV – ფერმის დონემ აკრძალული ზონის შუამდე მიაღწია ($F = E_i$). ტემპერატურამ იმდენად მოიმატა, რომ მიმდინარეობს მუხტის გადამტანთა გენერაცია სავალენტო ზონიდან, მათი კონცენტრაცია მკვეთრად იზრდება. საჭერ დონეზე ჩაჭე-

რილ ელექტრონს ხვრელთან შეხვედრის და რეკომბინაციის საშუალება უჩნდება, რის გამოც სიცოცხლის დრო იწყებს შემცირებას.

V – მუხტის თავისუფალ გადამტანთა კონცენტრაცია იმდენად გაიზარდა, რომ საჭერ ღონეზე განთავისუფლებული მდგომარეობა ფაქტიურად მყისიერად ივსება ელექტრონით, რომელიც ებმება რეკომბინაციის აქტში. სიცოცხლის დრო I უბანთან შედარებით შემცირებულია და კვლავ არ არის ტემპერატურაზე დამოკიდებული.

8.7. ნახევრად გამტარის ფოტომგრძობიარობა.

ფოტოგამტარობა

კრისტალზე ოპტიკური დიაპაზონის ელექტრომაგნიტური ტალღების დასხივებამ მრავალი მოვლენის აღძვრა შეიძლება განაპირობოს. ამ მოვლენებს ოპტიკურ და ფოტოელექტრულ ეფექტთა კლასებში აერთიანებენ. ფოტოელექტრულ მოვლენათა კლასი, თავის მხრივ, ორ ჯგუფად იყოფა: პირველ ჯგუფს მიეკუთვნება ის პროცესები, რომლებიც განათებისას კრისტალის ელექტროგამტარობის ცვლილებასთან (ფოტომგრძობიარობასთან) არიან დაკავშირებული, ხოლო თუ სინათლის ზემოქმედებით კრისტალის გარკვეულ წერტილებს შორის ჩნდება პოტენციალთა სხვაობა, მაშინ ისინი ფოტოვოლტაურ მოვლენათა ჯგუფს წარმოადგენენ.

სინათლის ფოტოელექტრულად აქტიური შთანთქმა (გამტარობის არსიდან გამომდინარე) მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის ან ძვრადობის ცვლილების გამომხატველ პროცესად უნდა მივიჩნიოთ. მარტივი მსჯელობით შეიძლება დავასაბუთოთ, რომ როგორც წესი, ფოტომგრძობიარობა კონცენტრაციის ცვლილებით არის განპირობებული, ხოლო ძვრადობა პრაქტიკულად მუდმივი რჩება. მართლაც, ძვრადობა წარმოადგენს რა ზონურ პარამეტრს, ერთნაირად ახასიათებს როგორც დაშვებულ ზონაში არსებულ წონასწორულ მუხტის გადამტანებს, ასევე სინათლის ზემოქმედებით დამატებით გენერირებულსაც. ძვრადობის ცვლილებას მხოლოდ იმ შემთხვევაში ექნება ადგილი, თუ კრისტალის ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის თავისებურებებიდან გამომდინარე, შესაძლებელია მუხტის თავისუფალი გადამტანების რამდენიმე ზონაში განაწილება (ან გადანაწილება). მაშასადამე, მივიჩნიოთ, რომ ფოტოგამტარობა უმეტესად ელექტრონების და ხვრელების ჭარბი კონცენტრაციებით არის განპირობებული.

დასხივებისას კრისტალის ელექტროგამტარობის სიდიდის ცვლილებას ფოტოგამტარობა ეწოდება

$$\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0 = e[(n\mu_n + p\mu_p) - (n_0\mu_n + p_0\mu_p)] = e(\Delta n\mu_n + \Delta p\mu_p) \quad (8.39)$$

თუმცა, უფრო ხშირად იყენებენ კუთრი ფოტომგრძობიარობის ცნებას – სინათლის ერთეულოვან ინტენსიობაზე გათვლილ ფარდობით ფოტოგამტარობას

$$S = \frac{\Delta\sigma}{I\sigma_0}. \quad (8.40)$$

ფოტოგამტარობა, ოპტიკურ ეფექტებთან და ლუმინესცენციასთან ერთად, ნახევრად გამტარის ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის, მუხტის გადამტანების მახასიათებელი პარამეტრების დადგენის მძლავრ მეთოდს წარმოადგენს. ამ თვალსაზრისით მნიშვნელოვანი ხდება ფოტოგამტარობის სპექტრული განაწილების, მისი აღძვრის და რელაქსაციის დროზე დამოკიდებულების შესწავლა. (8.39)-ში გავითვალისწინოთ, რომ სტაციონარულ პირობებში ელექტრონების და ხვრელების ჭარბი კონცენტრაციები მათი გენერაციის სიჩქარით და სიცოცხლის დროით განისაზღვრება

$$\Delta\sigma = eG(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p). \quad (8.41)$$

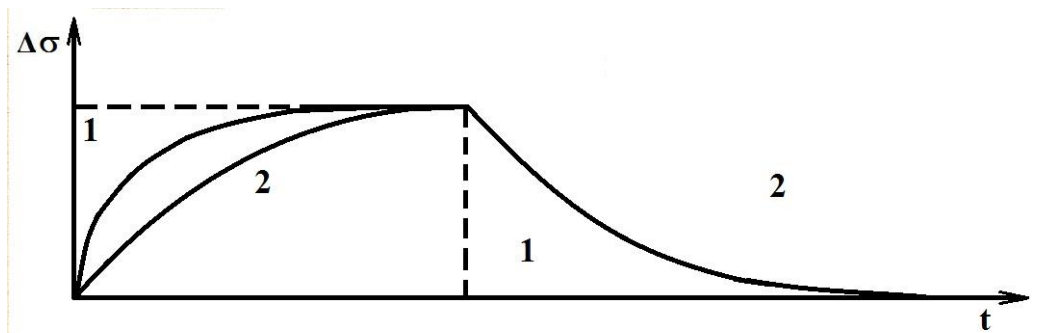
სინათლის ზემოქმედებით ელექტრონ-ხვრელური წყვილების გენერაციის სიჩქარე კრისტალის მახასიათებელ რამდენიმე პარამეტრზე და მისი ზედაპირის ერთეულოვან ფართობზე დაცემული ფოტონების რიცხვზე არის დამოკიდებული

$$G = \beta\alpha \frac{I_0}{\hbar\omega}(1-R), \quad (8.42)$$

აქ α და R შესაბამისად, შთანთქმის და არეკვლის კოეფიციენტებია, I_0 – დაცემული სინათლის ინტენსივობა, $\hbar\omega$ – კვანტის ენერგია, ხოლო β – კვანტური გამოსავალი, რომელიც გვიჩვენებს თუ შთანთქმული ფოტონების რიცხვიდან რა ნაწილი წავიდა ელექტრონ-ხვრელური წყვილების გენერაციაზე. (8.42)-ის გათვალისწინებით ფოტოგამტარობისათვის გვექნება

$$\Delta\sigma = e\beta\alpha \frac{I_0}{\hbar\omega}(1-R)(\mu_n\tau_n + \mu_p\tau_p) \quad (8.43)$$

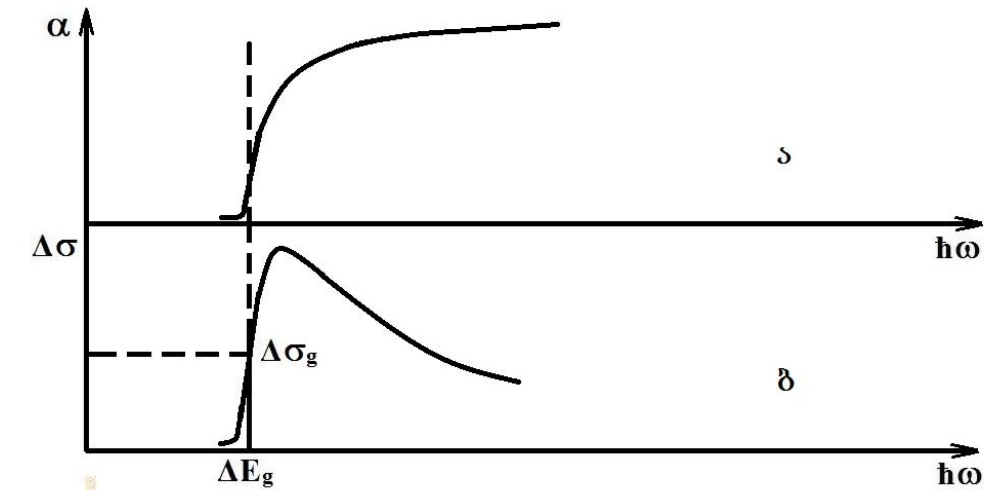
აღსანიშნავია, რომ ფოტოგამტარობის სინათლის ინტენსივობაზე წრფივი დამოკიდებულება სამართლიანია მხოლოდ სუსტი გენერაციისას. ზოგადად, ფოტოგამტარობა სინათლის ინტენსივობის ხარისხოვანი ფუნქციაა $\Delta\sigma \sim I_0^m$. როგორც ვეხსი, $0,5 < m < 1$, თუმცა შესაძლებელია, ზეწრფივი ფოტომგრძობიარობაც – $m > 1$.



ნახ. 8.11. ფოტოგამტარობის რელაქსაციური მრუდები საჭერი ცენტრების ორი სხვადასხვა კონცენტრაციისას ($N_{t2} > +N_{t1}$).

კრისტალში საჭერი ცენტრების არსებობა, მათზე მუხტის გადამტანების მიწვევების შესაძლებლობა, მნიშვნელოვან გავლენას ახდენს ფოტოგამტარობის კინეტიკაზე. საჭერ ღონეებზე მუხტის გადამტანების ჩაჭერა, მათი გენერაციისას, ანელებს გამტარობის ზრდის პროცესს სინათლის დასხივებისას. სინათლის გამორთვის შემდეგ, საჭერი ღონეების განთავისუფლება აჭიანურებს გამტარობის რელაქსაციას (ნახ. 8.11).

ისევე, როგორც ლუმინესცენციისათვის, ფოტოგამტარობისათვისაც დამახასიათებელია კარგი ანალოგია შთანთქმის კოეფიციენტის სპექტრულ კანონზომიერებებთან $\hbar\omega < \Delta E_g$ არეში, მაგრამ ზონათშორისო გადასვლების არეში ფოტოგამტარობა სწრაფად აღწევს მაქსიმუმს და შემდეგ მკვეთრად ეცემა (ნახ. 8.12). მიუხედავად იმისა, რომ კრისტალი, ცხადია, კვლავ შთანთქმის კოეფიციენტის მაღალი მნიშვნელობით ხასიათდება. მიზეზი, ამჯერად, პროცესზე ზედაპირის (ზედაპირული რეკომბინაციის) ზეგავლენაში იმალება, რაც მეტია კვანტის ენერგია და, ე.ი. შთანთქმის კოეფიციენტიც, მით უფრო თხელ ფენაში ხდება კრისტალში შეღწეული პრაქტიკულად ყველა ფოტონის შთანთქმა. მუხტის გადამტანების გენერაციის პროცესი იფარგლება ზედაპირის მახლობელი ფენებით, სადაც რეკომბინაციული ცენტრების სიმრავლე მკვეთრად ამცირებს მუხტის გადამტანების სიციცხლის დროს და, ე.ი. ფოტოგამტარობასაც



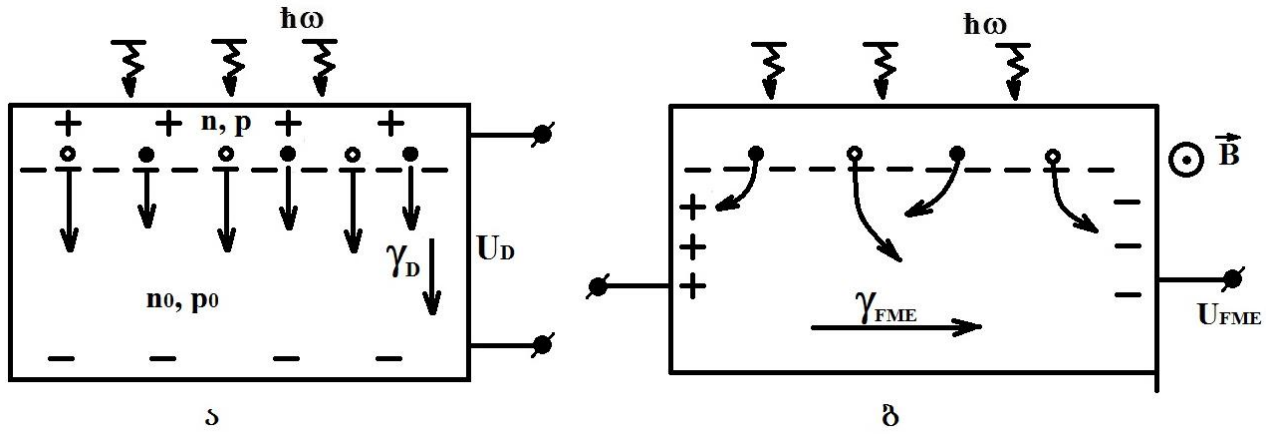
ნახ. 8.12. შთანთქმის (ა) და ფოტომატარობის (ბ) სპექტრები შთანთქმის საკუთარი კიდის მახლობლად ($\Delta\sigma_g = 0,5\Delta\sigma_{max}$).

ფოტოგამტარობის სპექტრული დამოკიდებულების მიხედვით ნახევრად გამტარის აკრძალული ზონის სიგანის დადგენის გამარტივებული პროცედურა შემოთავაზებული იყო ტ.მოსის მიერ. აკრძალული ზონის სიგანედ (საკმაოდ მაღალი სიზუსტით) შეიძლება მივიჩნიოთ იმ კვანტის ენერგია, რომელსაც სპექტრში ფოტოგამტარობის მაქსიმალური მნიშვნელობის 1/2 შეესაბამება ($\Delta\sigma_g$ ნახ. 8.12-ზე).

8.8. დემბერის და ფოტომაგნიტოელექტრული ეფექტები

ფოტოელექტრული მოვლენების უმრავლესობა ნიშნის არაერთგვაროვნებას უკავშირდება და ხშირად, სწორედ ამ არაერთგვაროვნებათა საზღვრებზე თამაშდება, მაგრამ არსებობს ისეთი ფოტოვოლტარული მოვლენა, რომლის აღძვრა ერთგვაროვან კრისტალშია შესაძლებელი და მის ფიზიკურ საფუძველს ელექტრონების და ხვრელების ძვრადობებში არსებული განსხვავება წარმოადგენს. მოვლენას დემბერის ეფექტს უწოდებენ.

ვთქვათ, კრისტალი განათებულია სინათლით, რომლის კვანტის ენერგია რამდენადმე მეტია აკრძალული ზონის სიგანეზე მაშინ, ელექტრონ-ხვრელური წყვილების გენერაციას ზედაპირის მახლობელ ფენებში ექნება ადგილი და დაიწყება ელექტრონების და ხვრელების დიფუზია ჭარბი კონცენტრაციის არიდან კრისტალის დანარჩენ, წონასწორული კონცენტრაციის არეში (ნახ. 8.13.), ვინაიდან ელექტრონის ძვრადობა მნიშვნელოვნად მეტია ხვრელების ძვრადობაზე, ელექტრონები უფრო სწრაფად მიადწევენ კრისტალის განათებულის მოპირდაპირე წახნაგს.



ნახ. 8.13. დემბერის (ა) და ფოტომაგნიტოელექტრული (ბ) ეფექტების აღძვრის სქემა

ორივე წახნაგზე დაირღვევა ელექტრონიტრალობის პირობა – ერთზე გაუკომპენსირებელი უარყოფითი, ხოლო მეორეზე – დადებითი მუხტების დაგროვების გამო. გაჩნდება შიდა ელექტრული – დემბერის ველი, რომლის გარკვეული მნიშვნელობისათვის მიღწეული იქნება სტაციონარული მდგომარეობა. კრისტალის ბოლოებს შორის აღძრული ძაბვა ძვრადობათა $b = \mu_n / \mu_p$ ფარდობის გარდა, ტემპერატურაზე და ჭარბი კონცენტრაციის სიდიდეზეა დამოკიდებული

$$U_D = \frac{k_0 T}{e} \frac{b-1}{b+1} \ln \left(1 + \frac{(b+1)\Delta n}{b(n_0 + p_0)} \right). \quad (8.44)$$

თუ კრისტალს მოვათავსებთ მაგნიტურ ველში, რომელიც სინათლის გავრცელების (და, ე.ი. მუხტის გადამტანების დიფუზური ნაკადის) მართობულია, მაშინ მაგნიტური ველის გავლენით მუხტის გადამტანების ტრაექტორიათა გამრუდების გამო (ნახ. 8.13. ბ) კრისტალში გაჩნდება ელექტრული ველი. ეს ველი 90°-იან კუთხეს ადგენს, როგორც სინათლის გავრცელების, ასევე, მაგნიტური ველის მიმართულებებთან და მას ფოტომაგნიტოელექტრულ ან კიკინ-ნოსკოვის ველს უწოდებენ. მოვლენა ჰოლის და ნერნსტ – ეტინგსჰაუზენის ეფექტების ანალოგებად შეიძლება მივიჩნიოთ.

ნახევრად გამტარები კლიერ ელექტრულ ველში

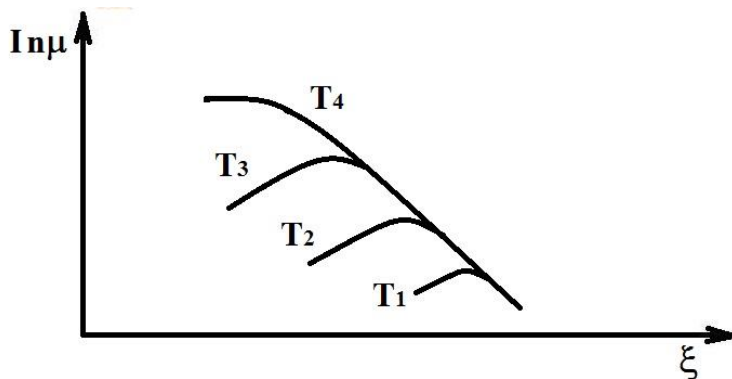
9.1. მუხტის გადამტანების ძვრადობა და კონცენტრაცია
 ძლიერ ელექტრულ ველში

ამ კურსის ფარგლებში განხილული კინეტიკური მოვლენების აბსოლუტური უმრავლესობა მიმდინარეობდა ისეთ ელექტრულ ველებში, რომლებსაც არ შესწევდათ უნარი ადვილათ მუხტის გადამტანების სითბური სიჩქარის თანაზომადი დრეიფული სიჩქარე. მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია და ძვრადობა ველის დაძაბულობაზე დამოუკიდებელ სიდიდეებს წარმოადგენდნენ და, ამდენად, კრისტალისათვის სამართლიანი იყო ომის კანონი

$$J = \sigma \vec{\xi}. \tag{9.1}$$

ცხადია, როცა ველის დაძაბულობა გარკვეულ ξ_k კრიტიკულ მნიშვნელობას გადააჭარბებს, ზემოსხენებული პირობები ირღვევა, რაც თავის მხრივ, ნახევრად გამტარი ხელსაწყოებისათვის მნიშვნელოვანი პროცესების, თუ მოვლენების აღძვრას უწყობს ხელს.

ძლიერ ელექტრულ ველში (მიიჩნევენ, რომ $\xi > \xi_k$, თუ დრეიფული სიჩქარე სითბური სიჩქარის 10% აჭარბებს) ძვრადობის ცვლილების ხასიათი გაბნევის მექანიზმზე დამოკიდებული, რაც τ რელაქსაციის დროის მუხტის გადამტანების ენერგიასთან არსებული კავშირიდან გამომდინარეობს (9.45). აკუსტიკურ ფონონებზე გაბნევისას $\mu \sim \varepsilon^{-1/2}$ და მაშასადამე ($\mu \sim V^{-1}$) ველის ზრდისას ძვრადობა მცირდება. თუ გაბნევა იონიზირებულ მინარევეებზე მიმდინარეობს, მაშინ $\mu \sim \varepsilon^{3/2}$ და ველის ზრდას ძვრადობის ზრდაც ($\mu \sim V^3$) ახლავს თან.



ნახ. 9.1. ძვრადობის დამოკიდებულება ძლიერი ელექტრული ველის დაძაბულობაზე სხვადასხვა ტემპერატურისას ($T_4 > T_3 > T_2 > T_1$)

ნახ. 9.1.-ზე მოყვანილია გაბნევის ამ ორი მექანიზმისათვის $\mu(\varepsilon)$ დამოკიდებულება კრისტალის მნიშვნელოვნად განსხვავებული ტემპერატურებისას და ცხადი ხდება, რომ ველის დაძაბულობის ზრდა ტემპერატურის მომატების ანალოგიურ ზემოქმედებას ახდენს ძვრადობაზე.

ძლიერ ელექტრულ ველში კონცენტრაციის ზრდის რამოდენიმე მექანიზმი არსებობს: 1) ფრენკელის ეფექტი; 2) დარტყმითი იონიზაცია; 3) ზინერის ეფექტი. პირველი მათგანი ელექტრული ველის გავლენით ძირითადად მინარეული ატომის იონიზაციისათვის საჭირო ენერგიის შემცირებას გულისხმობს, რაც ამ ატომის ელექტრონების პოტენციური ენერგიის ცვლილების შედეგია გარეშე ველში. მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის ელექტრული ველის დაძაბულობაზე დამოკიდებულება

$$n = Be^{-\frac{E_d - \Delta E}{2k_0T}} = n_0 e^{\frac{\Delta E}{2k_0T}} = n_0 e^{\beta \sqrt{\gamma}} \quad (9.2)$$

ომის კანონიდან შესაბამისი გადახრასაც განაპირობებს

$$J = \sigma_0 \varepsilon e^{\beta \sqrt{\gamma}}, \quad (9.3)$$

აქ n_0 და σ_0 კონცენტრაციის და ელექტროგამტარობის წონასწორული მნიშვნელობებია, ხოლო

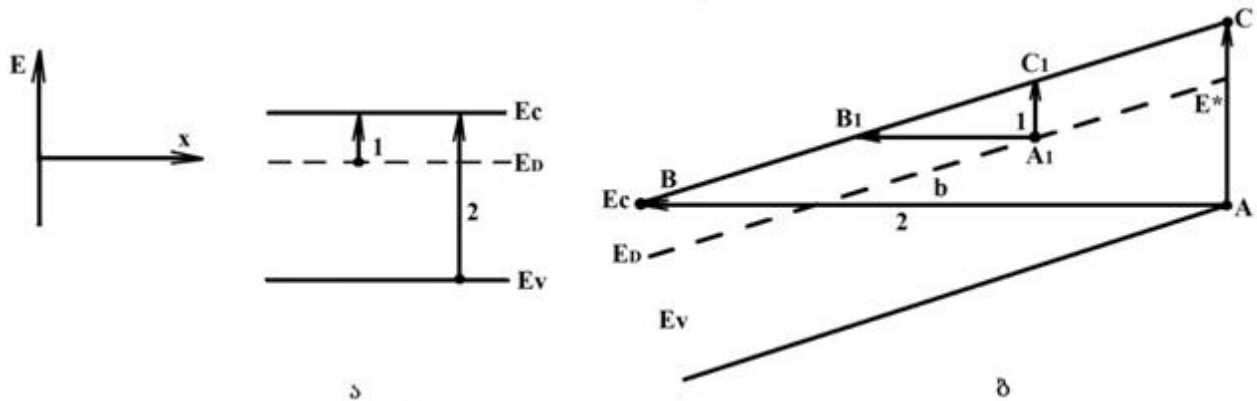
$$\beta = e^{\frac{3}{2}} (k_0 T \sqrt{\varepsilon^*})^{-1} \quad (9.4)$$

(ε^* კრისტალის დიელექტრიკული შეღწევადობაა).

კონცენტრაციის ზრდის მეორე მექანიზმი მარტივ ფიზიკურ მოსაზრებებს ეყრდნობა. ძლიერი ელექტრული ველის გავლენით გამტარობის ელექტრონი თავისუფალი განარბენის მანძილზე იმდენად დიდ კინეტიკურ ენერგიას აგროვებს, რომ მესრის შემადგენელ ატომებზე გაბნევისას ახერხებს გადასცეს მათ ახალი მუხტის გადამტანის გენერაციისათვის საჭირო ენერგია. ცხადია, უფრო ალბათურია მინარეული ატომის იონიზაცია, რადგან აკრძალული ზონის სიგანის ტოლი ენერგიის მისანიჭებლად შედარებით დიდი ველებია საჭირო. თუმცა, ისიც გასათვალისწინებელია, რომ აჩქარებული მუხტის გადამტანის მიერ ენერგიის დაგროვება რამდენიმე თავისუფალი განარბენის სიგრძეზე შეიძლება მიმდინარეობდეს (ე.ი. გაბნევის თითოეული აქტისას დაგროვებული ენერგიის მხოლოდ ნაწილი იკარგება).

ზინერის, ანუ გვირაბული ეფექტი ელექტრულ ველში ელექტრონის პოტენციური ენერგიის ცვლილების შედეგად ენერგეტიკული მდგომარეობის წანაცვლების, კოორდინატთა სივრცეში მათი დახრის ერთ-ერთი გამოვლენაა. (ელექტრული ველის პირობებში ზონების ენერგიის მანძილზე დამოკიდებულება შემდეგ პარაგრაფში იქნება განხილული). ნახ. 9.2.-ის შესაბამისად დაშვებული ზონების და

მინარეული დონის დახრა შესაძლებლად ხდის ენერჯიის დაუხარჯავად ელექტრონის გადაყვანას ბმული მდგომარეობიდან თავისუფალ მდგომარეობაში. ელექტრონი არსებული



ნახ. 9.2. დონორული დონიდან (1) და სავალენტო ზონიდან (2) გამტარობის ზონაში გადასვლის შესაძლებლობები სუსტ (ა) და ძლიერ (ბ) ელექტრულ ველებში

პოტენციური ბარიერის ($ABC, A_1B_1C_1$) გადაულახავად (ბარიერის ქვეშ) ახერხებს გამტარობის ზონაში გადასვლას, რის გამოც, ეს მოვლენა გვირახებული ეფექტის სახელწოდებით არის ცნობილი. ენერგეტიკული თვალსაზრისით, ასეთი „ჰორიზონტალური“ გადასვლის ალბათობა W დამოკიდებულია გამჭირვალობის P კოეფიციენტზე

$$W \sim e^{-P} \quad (9.5)$$

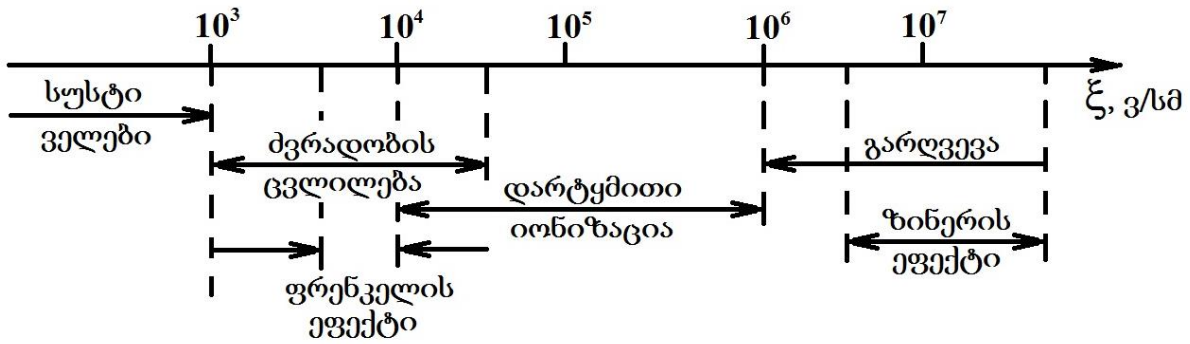
და

$$P = \frac{4\pi^2 m_n^* a^2}{h^2} b E^* \quad (9.6)$$

$b = E_0 / e\xi$ სიდიდეს (E_0 გადასვლის ენერჯიაა $-\Delta E_g, E_D$ და ა. შ.), რომელიც ტოლი ენერჯიის საწყის და საბოლოო წერტილებს გამოჰყოფს ერთმანეთისაგან, ბარიერის სიგანე ეწოდება. სწორედ იგი, ბარიერის E^* სიმაღლესთან და მესრის a მუდმივასთან ერთად, განსაზღვრავს გამჭირვალობის კოეფიციენტს.

ელექტრული ველის დაძაბულობის მნიშვნელოვანი ზრდისას, დარტყმითი იონიზაციის და ზინერის ეფექტების წყალობით, მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის ზრდამ შეიძლება ზეავური ხასიათი მიიღოს, რის გამოც მკვეთრად გაიზრდება გამტარობა, კრისტალში გამავალი დენი, გამოყოფილი სითბო – ადგილი ექნება გარღვევას და ნიშუში მწყობრიდან გამოვა, დაიშლება.

ჩვენს მიერ განხილული პროცესები ელექტრული ველის დაძაბულობის გარკვეული მნიშვნელობებით ხასიათდება. გამტარობის ზრდის მექანიზმის მოქმედების ეს საზღვრები ნახ. 9.3-ზეა მოყვანილი



ნახ.9.3. ძლიერი ელექტრული ველის ელექტროგამტარობაზე ზემოქმედების მექანიზმები

9.2. ზონების გამრუდება

როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ნახევრად გამტარზე სხვადასხვა გარეშე ზემოქმედების გავლენის შესწავლისას შეიძლება დავეყრდნოთ ეფექტური მასის მეთოდს (1.108), რომლის შესაბამისად ჰამილტონიანი ასე ჩაიწერება

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\vec{r}), \quad (9.7)$$

აქ $U(\vec{r})$ შემფოტების სახით ითვალისწინებს ელექტრონზე გარეშე ველის მოქმედებას, მაგრამ ანალიზისათვის უფრო გამოსადეგი გამოსახულება შეიძლება მივიღოთ, თუ შემფოტების თეორიის მაგივრად განხილული იქნება მოძრაობის კვანტური განტოლება, რომლის გამოყენება იდეალური ნახევრად გამტარის ჰამილტონიანისთვის

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) \quad (9.8)$$

მიგვიყვანს შემდეგ თანაფარდობამდე:

$$E_0(\vec{k}) + U(\vec{r}) = M_0(\vec{k}, \vec{r}) = const \quad (9.9)$$

$M_0(\vec{k}, \vec{r})$ აღნიშნულია გარეშე $U(\vec{r})$ პოტენციურ ველში მყოფი ელექტრონის ჰამილტონის ფუნქცია (დროზე დამოუკიდებელი).

(9.9)-ის მიყევართ მნიშვნელოვან დასკვნამდე, რომ კრისტალში მოძრავი ნაწილაკის სრული ენერგია H_0 რჩება მუდმივი. თუმცა, $E_0(\vec{k})$ კრისტალური ველი და $U(\vec{r})$ გარეშე ზემოქმედებით განპირობებული ენერგიები შეიძლება იცვლებოდნენ და ეს ცვლილებები ურთიერთსაპირისპირო ხასიათისაა ყოველთვის. ვინაიდან $E_0(\vec{k})$ შეიძლება შეიცვალოს მხოლოდ დაშვებული ზონის საზღვრებში, ამიტომ დაშ-

ვებული ზონის სიგანით იზღუდება $U'(\vec{r})$ ცვლილების შესაძლებლობაც. მართლაც, (9.9) გამოსახულების დიფერენცირებით

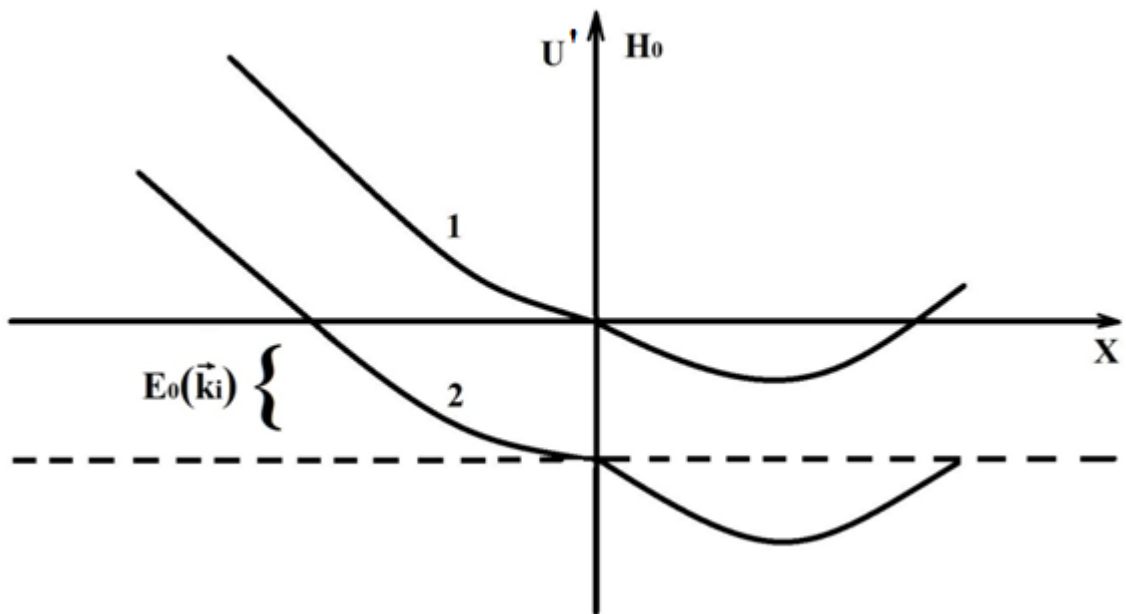
$$dE_0 + dU' = 0 \quad (9.10)$$

და

$$\sigma U' = -\sigma E_0 = E_{\min} - E_{\max}. \quad (9.11)$$

(9.11)-ის თანახმად ელექტრონი პერიოდულ, რხევით მოძრაობაში უნდა იღებდეს მონაწილეობას ველის გასწვრივ და ამ რხევის შესაბამისი მონაკვეთის სიგრძე გარეშე ძალის სიდიდებზეა დამოკიდებული

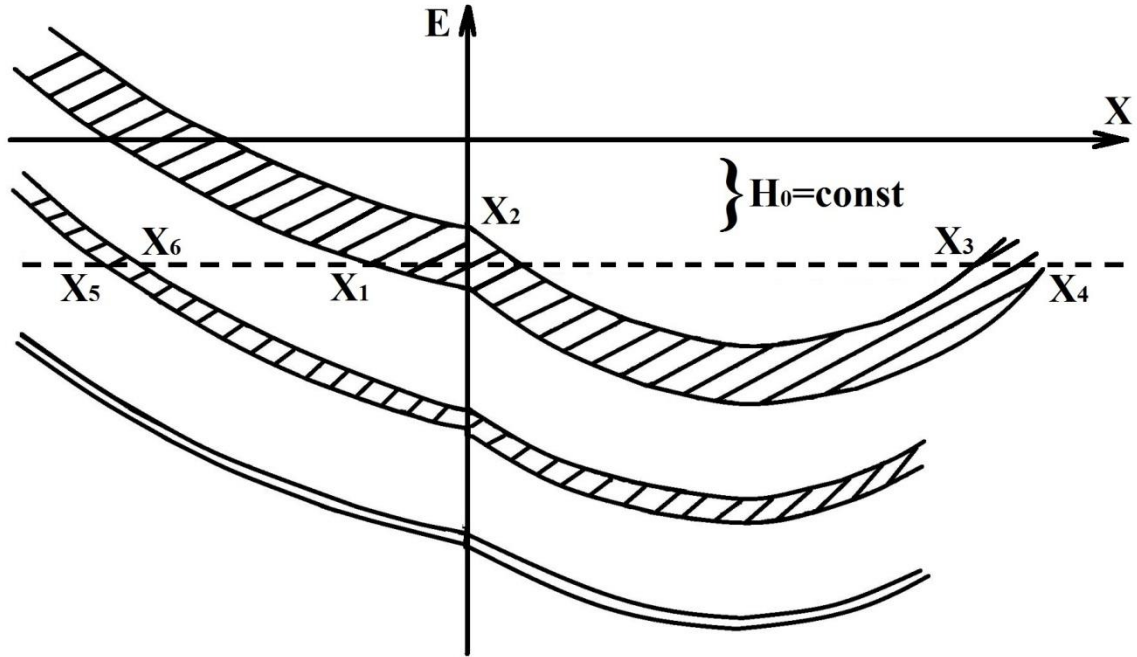
$$\sigma r = -\frac{\sigma U'}{F_0} = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{e\xi} \quad (9.12)$$



ნახ. 9.4. გარეშე ველში ელექტრონის პოტენციური ენერჯიის (1) და ჰამილტონის ფუნქციის (2) კოორდინატზე დამოკიდებულება

ვინაიდან $E_0(\vec{k})$ კოორდინატზე დამოკიდებული არ არის, ამიტომ ნებისმიერი ფიქსირებული $\vec{k} = \vec{k}_1$ ტალღური ვექტორის მნიშვნელობისათვის $H_0(\vec{r})$ დამოკიდებულებას $U'(\vec{r})$ -ის სახე განსაზღვრავს (ნახ. 9.4). თუ გათვალისწინებული იქნება ენერჯიის $E_0(\vec{k}_1)$ ყველა შესაძლო მნიშვნელობა – დადგინდება ზონების ენერგეტიკული განლაგების დამოკიდებულებაც კოორდინატზე (ნახ. 9.5). ამ დიაგრამის საფუძველზე, ძლიერი ელექტრული ველის მოქმედებას, ზონების ერთგვაროვან ველში დახრა. ზოგადად კი გამრუდობა შეიძლება დაუკავშიროთ, თავის მხრივ, ზონების გამრუდება კრისტალში – ელექტრონის მოძრაობის ყველა თავისებურების (მათ შორის გვირაბული ეფექტის) ახსნის საშუალებას გვაძლევს. აქ გაბნევას არა აქვს ადგილი, მაშინ ელექტრონის სრული ენერჯიის შეუცვლელად გადადის ზონის

ერთი დონიდან მეორეზე. მაგალითად $x_1 - x_2$, $x_3 - x_4$, $x_5 - x_6$ წერტილებს შორის რხევითი მოძრაობისას. გაბნევის შემთხვევაში, ველში შექმნილი ენერგია გადაეცემა კრისტალურ მესერს და ელექტრონი რჩება ზონის ერთსა და იმავე დონეზე კრისტალში ნებისმიერ მანძილზე გადაადგილებისას.



ნახ. 9.5. დაშვებულ ზონებში ელექტრონის ენერგიის კოორდინატზე დამოკიდებულება

ამავე დროს, ნახ. 9.5. შესაბამისად, ელექტრონი შეიძლება $x_5 - x_6$ მონაკვეთის წერტილებიდან გადავიდეს $x_1 - x_2$ მონაკვეთის წერტილში ანუ გადავიდეს ენერგიის მიხედვით გენეტიკურად უფრო მაღლა განლაგებულ ზონაში. თუმცა გადასვლებს $x_5 \rightarrow x_1$ და $x_1 \rightarrow x_5$ ენერგეტიკულად თანასწორუფლებიანია. ის გადასვლებია უფრო ალბათური, რომლებიც ელექტრონების შედარებით უფრო მაღალი კონცენტრაციის ზონიდან მიმდინარეობს. ამდენად, ძლიერმა ელექტრულმა ველმა გამტარობის ზონაში ელექტრონების კონცენტრაციის მკვეთრი ზრდა შეიძლება განაპირობოს, რაც ჩვენს მიერ უკვე განხილული ზინერის ეფექტის არსს წარმოადგენს.

თერმოელექტრული მოვლენების განხილვისას (9.2) აღნიშნული იყო ორი კრისტალის კონტაქტის მახლობელ ფენებში. მუხტის გადამტანების გადანაწილებით კონტაქტურ პოტენციალთა სხვაობის აღძვრის შესაძლებლობა. ცხადია, ამ კონტაქტურმა ელექტრულმა ველმაც შეიძლება განაპირობოს ენერგეტიკული ზონების გამრუდება და ნახევრად გამტარული ხელსაწყოებისათვის

უაღრესად მნიშვნელოვანი პროცესების გამომწვევე მიზეზად მოგვევლინოს. მოკლედ შევეხოთ ამ პროცესების ფიზიკურ საფუძვლებს ელექტრულ ველში მოთავსებული n და p ტიპის ნახევრად გამტარების (ნახ. 9.6.) თავისუფალი ზედაპირის მახლობელი ფენების მაგალითზე. ელექტრული ველის მიმართულების მიხედვით, ნახევრად გამტარის ზედაპირის მახლობელი ფენები ან გამდიდრდება (ველის ეფექტი), ან გაღარიბდება მუხტის ძირითადი გადამტანებით. ზედაპირზე კონცენტრაციის სიდიდე n_s შეიძლება მნიშვნელოვნად განსხვავდებოდეს კრისტალის მოცულობისათვის დამახასიათებელი წონასწორული კონცენტრაციისაგან (n_0). ელექტრონეიტრალობის პირობა ზედაპირის მახლობლად დაირღვევა, ჩამოყალიბდება სივრცული მუხტი და ფორმირებული სტაციონარული შიგა ელექტრული ველი გამოიწვევს დაშვებული ზონების, თუ ლოკალური დონეების ენერგიების ცვლელებას მანძილის მიხედვით

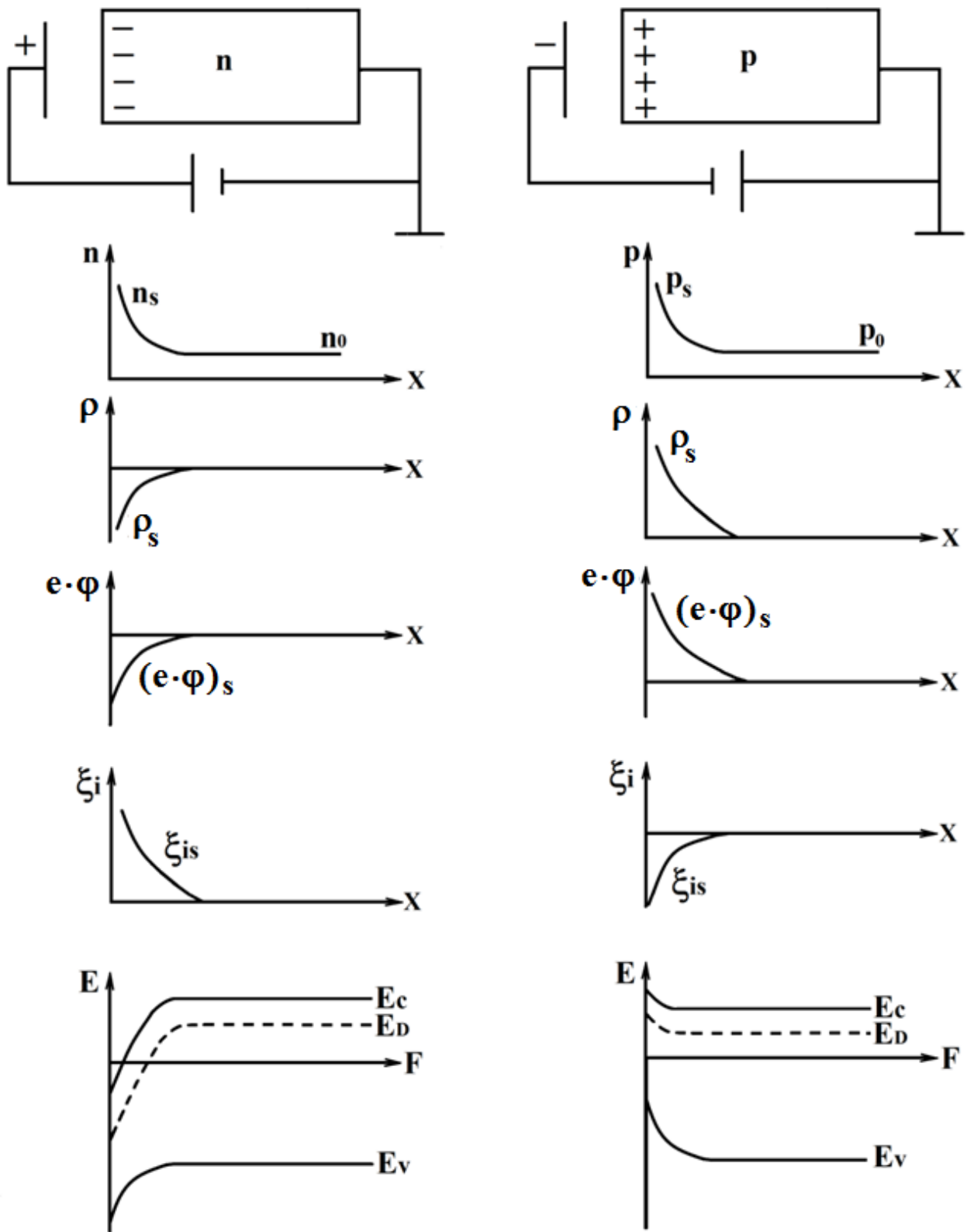
$$n_s = n_0 e^{\pm \frac{e\phi_s}{k_0 T}}, \quad (9.13)$$

აქ ϕ_s ზედაპირზე ელექტროსტატიკური პოტენციალის მნიშვნელობაა. ცხადია, საკმარისად ძლიერი ველების შემთხვევაში ზედაპირის მახლობელი ფენების გაღარიბებამ გამტარობის ტიპის ცვლილებაც კი შეიძლება განაპირობოს. ასეთი ინვერსიული ფენების ჩამოყალიბება ნიშნავს, რომ ზედაპირის მოშორებით, კრისტალის სიღრმეში მოიძებნება ეგრეთწოდებული i ფენაც, სადაც $n \approx p = n_1$ და მას ფიზიკურ $p-n$ გადასასვლელს უწოდებენ. ამრიგად, გარეშე ძლიერი ელექტრული ველის მოდებით და მისი მოქმედების შეწყვეტით, შესაძლებელია ერთგვაროვან კრისტალში ფიზიკური $p-n$ გადასასვლელის ჩამოყალიბებაც და მოშლაც.

კრისტალში ელექტრული ველის შეღწევის სიღრმე და ე.ი. მუხტის ძირითადი გადამტანებით გამდიდრებული, თუ გაღარიბებული ფენის სისქეც გამოისახება სიდიდით, რომელსაც დებაის ეკრანირების სიგრძეს უწოდებენ. L_D განსაზღვრავს მანძილს, რომელზეც ელექტროსტატიკური პოტენციალი e ნეპერის რიცხვჯერ იცვლება $\phi = \phi_s \exp(-x/L_D)$. ის მუხტის გადამტანების კონცენტრაციაზე, დიელექტრიკულ შეღწევადობასა და ტემპერატურაზეა დამოკიდებული

$$L_D = \frac{1}{e} \left(\frac{\epsilon^* \epsilon_0 k_0 T}{n_0} \right)^{1/2} \quad (9.14)$$

ნახევრად გამტარებში L_D რამოდენიმე მკმ-ს შეადგენს.

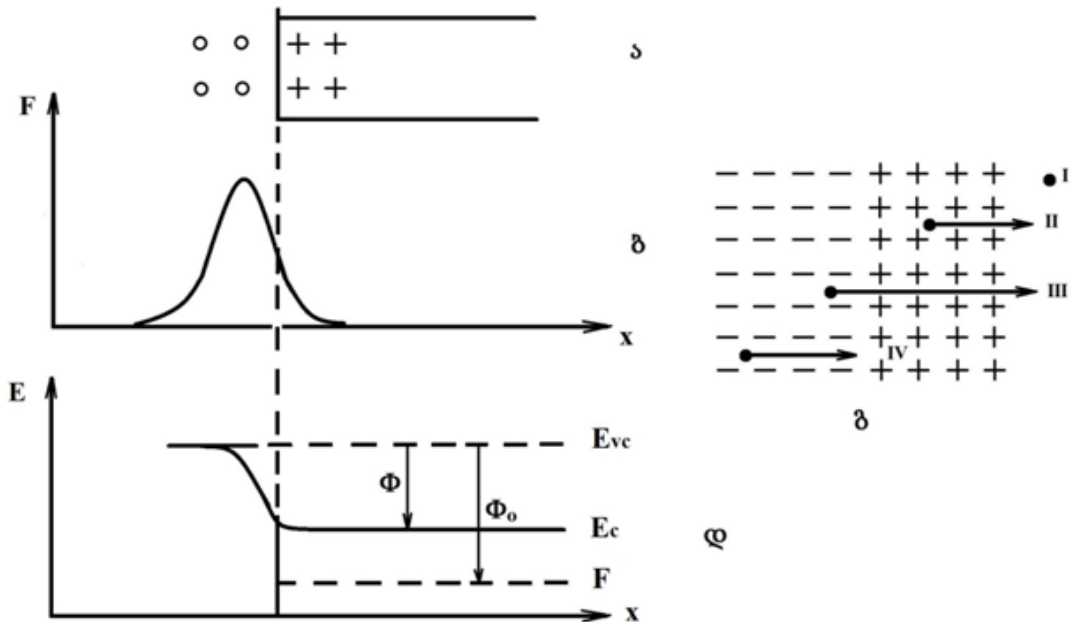


ნახ. 9.6. n და p ტიპის ნახევრად გამტარებში, ზედაპირის მახლობელ ფენებში მუხტის გადამტანების კონცენტრაციის, სივრცული მუხტის, პოტენციური ენერჯის, შიგა ელექტრული ველის განაწილება სიღრმის მიხედვით და ენერგეტიკული ზონების გამრუდება გარეშე ელექტრულ ველში

9.3. გამოსვლის მუშაობა. ზედაპირული მდგომარეობები

ვაკუუმში მოთავსებული კრისტალის ზედაპირის მახლობლად ყოველთვის არსებობს კრისტალიდან ამოფრქვეული ელექტრონების ღრუბელი. კრისტალში ზედაპირის მახლობელ ფენებში კი რჩება გაუკომპენსირებელი დადებითი მუხტი. ეს დამუხტული ორმაგი შრე (ნახ. 9.7) ელექტრული ძალით (რომელიც ზედაპირზეა მაქსიმალური) იცავს კრისტალს ელექტრონების მნიშვნელოვანი ემისიისაგან, ვინაიდან ორმაგი დამუხტული შრე ჯამში ელექტრონიტრალურია, მის ზემოქმედებას მხოლოდ უშუალოდ ამ შრეში მოხვედრილი ელექტრონი განიცდის, თანაც მით უფრო ძლიერად, რაც უფრო ახლოს აღმოჩნდება ის დადებითი და უარყოფითი მუხტის საზღვართან (მაგალითად, ნახ. 9.7. გ-ზე I ელექტრონზე მოქმედი ძალა ნულის ტოლია, ხოლო III – მაქსიმალური). მაშასადამე, ვაკუუმში გამოსასვლელად ელექტრონმა უნდა დაძლიოს პოტენციური ბარიერი (ნახ. 9.7. დ), რომლის სიმაღლე დამუხტული ორმაგი შრის დასაძლევად საჭირო მუშაობის სიდიდით განისაზღვრება. ვაკუუმში გადასული ელექტრონის დასახასიათებლად მოსახერხებელია გამოვიყენოთ ამ პოტენციური ბარიერის შესაბამისი მაქსიმალური ენერგია (მას E_{vc} ვაკუუმურ დონეს უწოდებენ), ხოლო ბარიერის სიმაღლეს კი დავუკავშიროთ ე.წ. გამოსვლის მუშაობა

$$\Phi = E_{vc} - E_c. \quad (9.15)$$



ნახ. 9.7. ვაკუუმში კრისტალის ზედაპირის მახლობლად დამუხტული ორმაგი შრის (ა), ელექტრონის დამაბრუნებელი ძალის განაწილების (ბ.გ) და პოტენციური ბარიერის (დ) სქემა

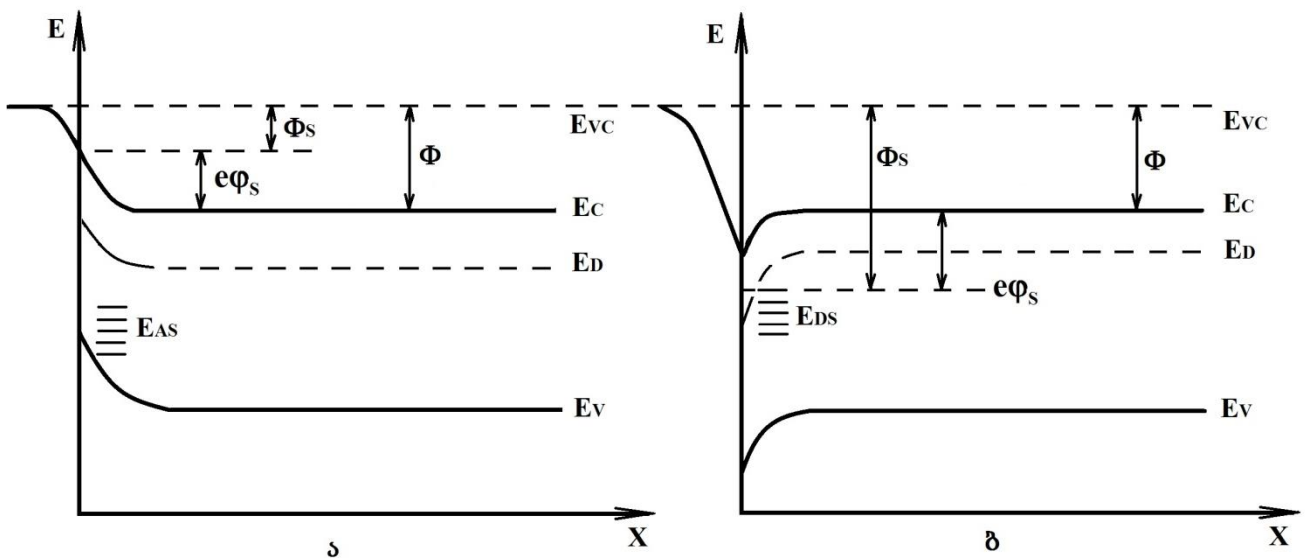
თეორიაში ხშირად ვაკუუმური დონის სიმაღლეს აითვლიან არა გამტარობის ზონის ძირიდან, არამედ ფერმის დონიდან (თერმოდინამიკური გამოსვლის მუშაობა)

$$\Phi_0 = E_{vc} - F \quad (9.16)$$

გადაუგვარებელ ნახევრად გამტარებში $\Phi < \Phi_0$, ხოლო ლითონებში და გადაგვარებულ ნახევრად გამტარებში $\Phi > \Phi_0$.

კრისტალის ზედაპირის როლი დამუხტული ორმაგი შრის წარმოქმნით არ იფარგლება. როგორც არაერთხელ იყო აღნიშნული, ზედაპირი მდიდარია სხვადასხვა სახის დეფექტებით. აქ ირღვევა მოცულობისათვის დამახასიათებელი მესრის პერიოდულობა, იცვლება ნაწილაკებს შორის ბმის პირობები. ყოველივე ამის გამო, აკრძალულ ზონაში, ზედაპირის მახლობლად ჩნდება ლოკალურ ენერგეტიკულ მდგომარეობათა მთელი სერია (ზედაპირული, ტამის დონეები). ისევე, როგორც მოცულობითი, ზედაპირული მდგომარეობებიც შეიძლება იყოს დონორული და აქცეპტორული, თხელი და ღრმა. მათ რაოდენობრივ ზომად მიჩნეულია ზედაპირის ფართობის ერთეულზე მოსული ზედაპირული მდგომარეობების რიცხვი.

ზედაპირული აქცეპტორების გავლენით კრისტალის ზედაპირის მახლობელი ფენა გაღარიბდება ელექტრონებით, ადგილი ექნება ზონების დამატებით გამრუდებას, გამოსვლის მუშაობის ცვლილებას, შესაძლებელია ინვერსიული ფენის ჩამოყალიბებაც. პირიქით, დონორული მდგომარეობები ხელს უწყობენ ზედაპირის ელექტრონებით გამდიდრებას (ნახ. 9.8).



ნახ. 9.8. ზედაპირული აქცეპტორული (ა) და დონორული (ბ) მდგომარეობების გავლენა n ტიპის ნახევრად გამტარის ზედაპირის მახლობელ ფენებზე

$$\Phi_s = \Phi \pm e\phi_s, \quad n_s = n_0 \exp(\pm e\phi_s/k_0T)$$

9.4. განის ეფექტი

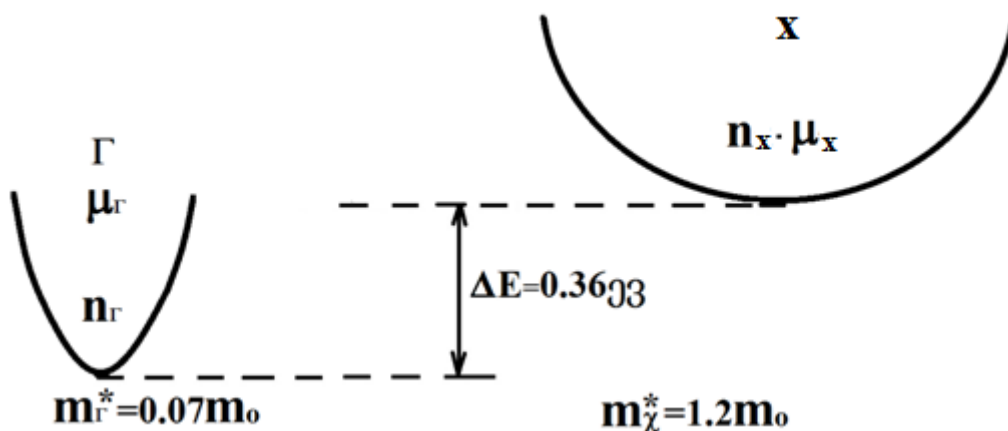
1963 წელს, *GaAs* და *InP* კრისტალების ვოლტ-ამპერული დამოკიდებულებების კვლევისას, განმა აღმოაჩინა დენის სპონტანური რხევები, რომელთა აღძვრას ადგილი აქვს გარკვეულ კრიტიკულ მნიშვნელობებზე ($\xi_k > 10^4$ ვ/სმ) უფრო ძლიერი ელექტრული ველის მოდების შემთხვევაში. მოვლენას განის ეფექტი ეწოდა და ის აიხსნა რიდლი-უოტკინს-ჰილსუმის მოდელით.

მუდმივი ძლიერი ელექტრული ველის პირობებში დენის მაღალი სიხშირის რხევების აღძვრა შესაძლებელია მხოლოდ ისეთ ნახევრად გამტარში, რომლის ზონური აგებულება და მახასიათებელი პარამეტრები რამდენიმე საკმაოდ მკაცრ მოთხოვნას აკმაყოფილებს. ენერგეტიკულ სპექტრში უნდა არსებობდეს (მაგალითად, *GaAs*-ის მსგავსად) ორი ენერგეტიკულად საკმაოდ ახლოს განლაგებული გამტარობის ზონა, რომელთა ეფექტური მასები და ე.ი. ძვრადობებიც მნიშვნელოვნად განსხვავდება ერთმანეთისაგან (ნახ. 9.9). შედარებით სუსტი ველისას ($\xi < \xi_k$) გამტარობის ყველა ელექტრონი თავმოყრილია მაღალი ძვრადობის Γ მინიმუმში და მხოლოდ ეს მსუბუქი ელექტრონები განსაზღვრავენ დენის სიდიდეს

$$J = en_r \mu_r \xi, \quad (9.17)$$

თუ ველი გადააჭარბებს კრიტიკულ მნიშვნელობას, ელექტრონების ნაწილი იქნეს ზონათაშორისო გაბნევისათვის საკმარის ენერგიას, გადანაწილდებიან Γ და X ექსტრემუმებს შორის და კრისტალის გამტარობა განპირობებული იქნება უკვე, როგორც სწრაფი Γ , ასევე ნელი X ელექტრონებით

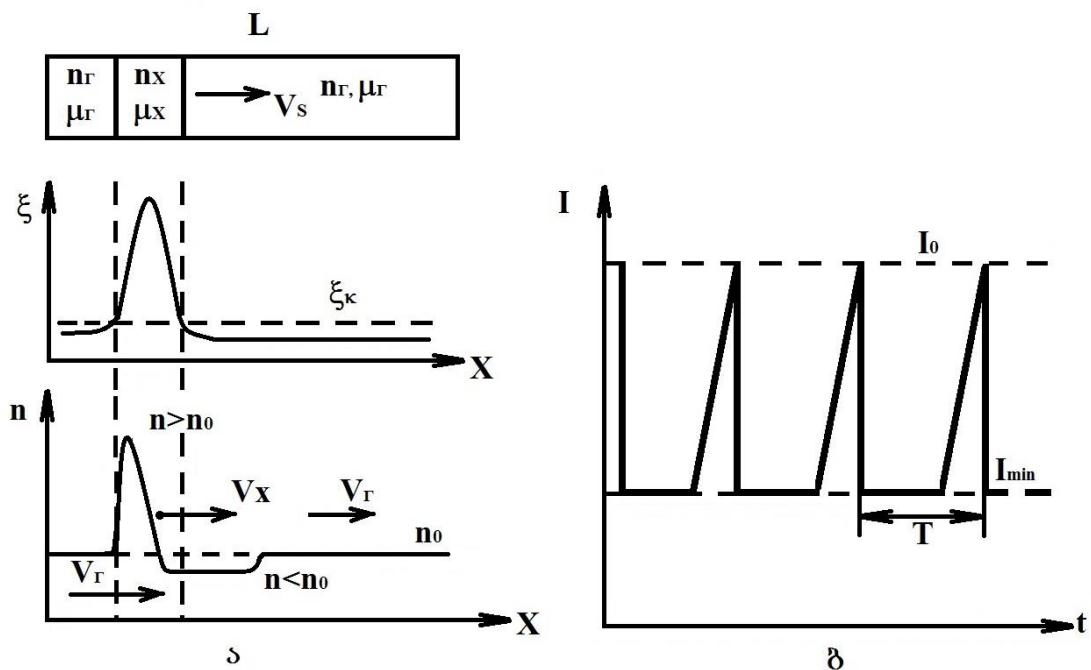
$$J = e(n_r \mu_r + n_x \mu_x) \xi. \quad (5.18)$$



ნახ. 9.9. განის ეფექტის აღძვრისათვის აუცილებელი ზონური აგებულების თავისებურებები *GaAs*-ის მაგალითზე

ეგექტის არსში გასარკვევად განვიხილოთ L სიგრძის კრისტალი, რომელშიც ველის დაძაბულობა ყველგან უახლოვდება ξ_k -ს, გარდა კათოდის მახლობელი მცირე უბნისა, სადაც (მაგალითად, ლევირების არაერთგვაროვნების გამო) წინაღობა შედარებით დიდია და $\xi > \xi_k$ (ნახ. 9.10). სწორედ აქ ექნება ადგილი ელექტრონების ზონათაშორისო გაბნევას, მათი ძვრადობა შემცირდება და უბნის წინაღობა კიდევ უფრო გაიზრდება, ვინაიდან ძლიერი ველის არის (ელექტრული დომენის) ორივე საზღვრის გარეთ ელექტრონები უფრო სწრაფად მოძრაობენ, ვიდრე თვით ამ არეში, მისი წინა ფრონტი გადარიბდება, ხოლო უკანა ფრონტი გამდიდრდება ელექტრონებით. ე.ი. ფაქტიურად ადგილი ექნება ჩამოყალიბებული დომენის მოძრაობას ანოდისაკენ, რომლის მიღწევისას დომენი იშლება. დომენის ჩამოყალიბების, V_s სიჩქარით მოძრაობის და დაშლის შედეგად ჩნდება სწორედ დენის რხევები. მართლაც, ძაბვის მოდებისას დენი სწრაფად მიაღწევს მოცემული კრისტალისათვის დამახასიათებელ ნომინალურ I_0 მნიშვნელობას, მაგრამ მაშინვე დომენის ჩამოყალიბების შედეგად, დენი დაეცემა I_{min} მნიშვნელობამდე. დომენის დაშლისას აღსდგება დენის I_0 სიდიდე, მაგრამ კათოდის მახლობლად ახალი დომენის ჩამოყალიბების გამო პროცესი თავიდან გამეორდება. აღძრული რხევების პერიოდი კრისტალის სიგრძესა და დომენის მოძრაობის სიჩქარეზეა დამოკიდებული

$$T = \frac{L}{V_s} \quad (5.19)$$



ნახ. 9.10. ელექტრული დომენის სტრუქტურა (ა) და

კრისტალში აღძრული დენის რხევები (ბ)
 დომენის მოძრაობის სიჩქარე $V_s \approx 0,5$ მ/წმ განსაზღვრავს აგრეთვე დენის მინიმალურ მნიშვნელობას

$$I_{\min} = en_0 V_s S \quad (5.20)$$

და რამდენიმე ათეული მკმ-ის სიგრძის კრისტალში $\approx 10^{10}$ სისშირის რხევებს უზრუნველყოფს. აღსანიშნავია, რომ დომენის ჩამოყალიბება გაცილებით უფრო სწრაფად მიმდინარეობს, ვიდრე მისი დაშლა.

დასასრულ, კიდევ ერთხელ შევეხოთ ზონური აგებულებისადმი ზემოთ ნახსენებ მოთხოვნებს. დენის რხევების ეფექტური მიმდინარეობისათვის ექსტრემუმებს შორის ღრეჩო არ უნდა იყოს დიდი, რადგან გართულება ელექტრონების ზედა ზონაში გადასროლა, მაგრამ არც ძალიან მცირე უნდა იყოს, ვინაიდან ამ შემთხვევაში ადგილი ექნება ელექტრონების თავისთავად ზონათაშორისო გაბნევას.

სარჩევნო

შესავალი.....	2
ნახევრად გამტარი. ნახევრად გამტარი მასალები.....	2
თავი I	
მუხტის გადამტანების ენერგეტიკული სპექტრი იდეალურ ნახევრად გამტარში.....	4
1.1. ელექტრონები იდეალურ კრისტალში. შრედინგერის განტოლება.....	4
1.2. ენერგეტიკული სპექტრის ზონური ხასიათი.....	6
1.3. ადიაბატური და ერთელექტრონიანი მიახლოება.....	7
1.4. კრისტალური მესრის პერიოდული ველი. ბლოხის ტალღური ფუნქცია. კვაზიმპულსი.....	11
1.5. თითქმის თავისუფალი და ძლიერად ბმული ელექტრონის მიახლოებები.....	13
1.6. ელექტრონის მდგომარეობათა რაოდენობა დაშვებულ ზონაში.....	20
1.7. ელექტრონის ენერგიის ტალღურ ვექტორზე_დამოკიდებულების სახე.....	23
1.8. ზონების ელექტრონული მდგომარეობების შევსება. მყარი სხეულების კლასიფიკაცია.....	26
1.9. მუხტის გადამტანების ეფექტური მასა დისპერსიის კვადრატული იზოტროპული კანონი.....	27
1.10. ეფექტური მასის მეთოდი.....	30
1.11. კრისტალში ელექტრონის მოძრაობის_თავისებურებანი.....	31
თავი II	
მუხტის გადამტანების ენერგეტიკული ზონური სტრუქტურის ელემენტები რეალურ ნახევრად გამტარში	
2.1. ნახევრად გამტარის საკუთარი გამტარობა. ხვრელები.....	35
2.2 ბრილუენის ზონები.....	39
2.3. ეფექტური მასის ანიზოტროპია. დისპერსიის კვადრატული ანიზოტროპული კანონი.....	41
2.4. სპინ-ორბიტული ურთიერთქმედება. სავალენტო ზონის მაქსიმუმის აგებულება.....	43
2.5. რეალური ნახევრად გამტარების ზონური აგებულების მაგალითები.....	45
2.6. დეფექტები ნახევრად გამტარებში. მინარეული გამტარობა.....	50
2.7. მინარეული მდგომარეობის ელემენტარული თეორია.....	54
2.8. ექსიტონი. პოლარონი.....	56
თავი III.	
მუხტის გადამტანების სტატისტიკა_ნახევრად გამტარებში	
3.1. განაწილების ფუნქცია. ფერმის ენერგია.....	59

3.2. მდგომარეობათა სიმკვრივე. მდგომარეობათა სიმკვრივის ეფექტური მასა.....	62
3.3. ფერმი-დირაკის განაწილების ფუნქცია.....	65
3.4. მუხტის გადამტანების კონცენტრაცია დაშვებულ ზონებში და ლოკალურ დონეებზე.....	67
3.5. ფერმის დონე საკუთარ ნახევრად გამტარში.....	71
3.6. ფერმის დონე მინარეულ ნახევრად გამტარში.....	73
თავი IV	
მუხტის გადამტანების გაბნევა	
4.1 გაბნევის პროცესის მახასიათებელი პარამეტრები.....	77
4.2 გაბნევა ნეიტრალურ და დაიონებულ მინარევეებზე.....	80
4.3. მესრის სითბური რხევები. _ფონონების სტატისტიკის ელემენტები.....	82
4.4. მუხტის გადამტანების გაბნევა მესრის სითბურ რხევებზე.....	88
4.5. მუხტის გადამტანების შერეული გაბნევა.....	91
თავი V	
კინეტიკური მოვლენები ნახევრად გამტარებში	
5.1. ელექტრო გამტარობა. ძვრადობა.....	93
5.2. თერმოელექტრული მოვლენები.....	96
5.3. ზეებეკის ეფექტი.....	98
5.4. პელტიეს და ტომსონის ეფექტები.....	102
5.5. სითბოგამტარობა ნახევრად გამტარში.....	104
5.6. გალვანომაგნიტური მოვლენები.....	107
5.7. ჰოლის ეფექტი.....	109
5.8. გაუსის ეფექტი.....	113
5.9. ეტინგსჰაუზენისა და ნერნსტის ეფექტები.....	114
5.10 თერმომაგნიტური მოვლენები.....	116
თავი VI	
ოპტიკური მოვლენები ნახევრად გამტარებში	
6.1. ოპტიკური პარამეტრები და კავშირი მათ შორის.....	120
6.2. ოსცილატორის ძალა. _კომბინირებულ მდგომარეობათა სიმკვრივე.....	124
6.3. საკუთარი და ექსიტონური შთანთქმა.....	129
6.4. მინარეული შთანთქმა.....	135
6.5. შთანთქმა მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე და შიდაზონური შთანთქმა.....	137
6.6. სინათლის არეკვლა მუხტის თავისუფალ გადამტანებზე (პლაზმური არეკვლა).....	139

6.7. შთანთქმა მესრის სითბურ რხევებზე.....142

თავი VII

მაგნიტოოპტიკური და ოსცილაციური მოვლენები

7.1. დისპერსიის კანონი მაგნიტურ ველში. _ლანდაუს დონეები..... 145

7.2. ციკლოტრონული რეზონანსი 147

7.3. ზონათაშორისო მაგნიტოშთანთქმა 148

7.4. მაგნიტოოპტიკური მოვლენები. _ფარადეის და ფოიხტის ეფექტები..... 150

7.5. ოსცილაციური მოვლენები..... 153

თავი VIII

რეკომბინაციული მოვლენები

8.1. წონასწორული და არაწონასწორული _კონცენტრაციები..... 156

8.2. არაწონასწორული მუხტის გადამტანების სიციცხლის დრო ბიპოლარული და მონოპოლარული გენერაციისას..... 159

8.3. მუხტის გადამტანების დიფუზური სიგრძე..... 161

8.4. რეკომბინაციის ძირითადი მექანიზმები 163

8.5. ლუმინესცენცია ნახევრად გამტარში 167

8.6. მუხტის გადამტანების სიციცხლის დროის დამოკიდებულება ფერმის დონის მდებარეობასა და ტემპერატურაზე..... 168

8.7. ნახევრად გამტარის ფოტომგრძობიარობა. _ფოტოგამტარობა..... 173

8.8. დემბერის და ფოტომაგნიტოელექტრული ეფექტები 176

თავი IX

ნახევრად გამტარები ძლიერ ელექტრულ ველში

9.1. მუხტის გადამტანების ძვრადობა და კონცენტრაცია ძლიერ ელექტრულ ველში..... 178

9.2. ზონების გამრუდება..... 181

9.3. გამოსვლის მუშაობა. ზედაპირული მდგომარეობები..... 186

9.4. განის ეფექტი..... 188