

Лекция 4

Қатты денелердің аймақтық теориясы. Заряд тасымалдаушыларының концентрациясы.

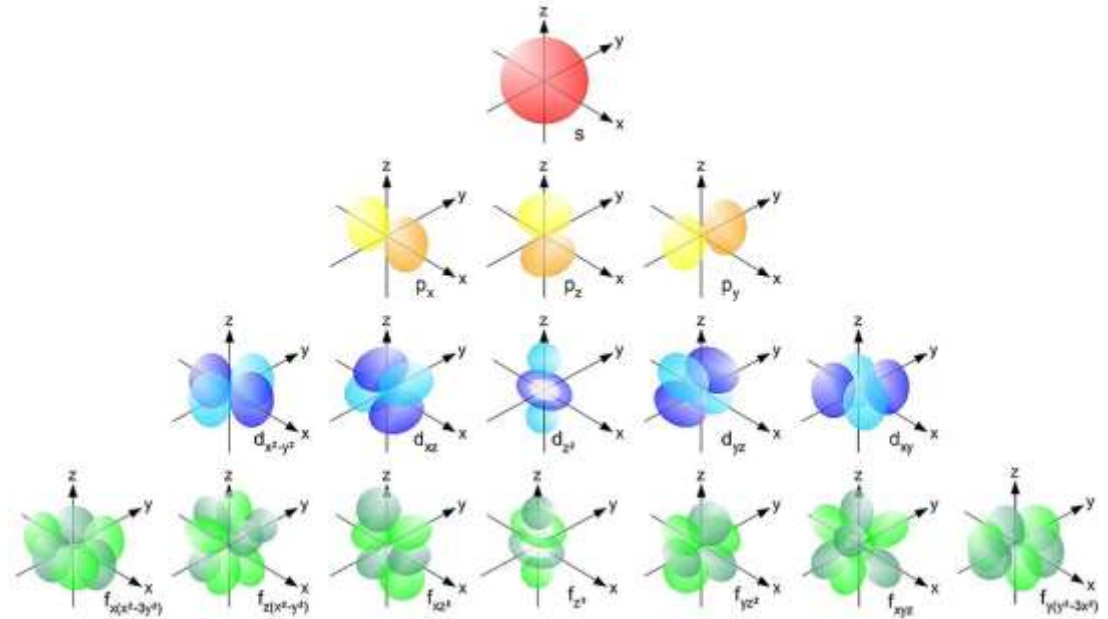
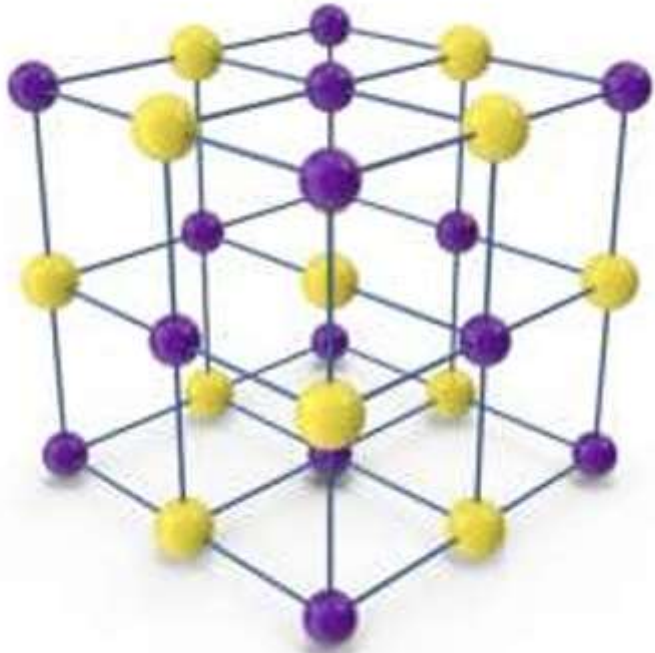
Дәрістің мақсаты:

- Қатты денелердің аймақтық (зоналық) теориясының физикалық негіздерін түсіндіру және заряд тасымалдаушыларының концентрациясын сипаттайтын негізгі ұғымдармен таныстыру. Лекция барысында кристалдық құрылымдағы электрондардың кванттық-механикалық қозғалысы, энергетикалық аймақтардың (валенттік, тыйым салынған және өткізгіштік аймақтар) пайда болу механизмі және шалаөткізгіштер мен өткізгіштердің электрлік қасиеттерін анықтайтын факторлар қарастырылады. Сонымен қатар, заряд тасымалдаушыларының концентрациясын есептеу әдістері, Ферми деңгейінің рөлі және температураға тәуелділігі зерттеледі.

Кіріспе

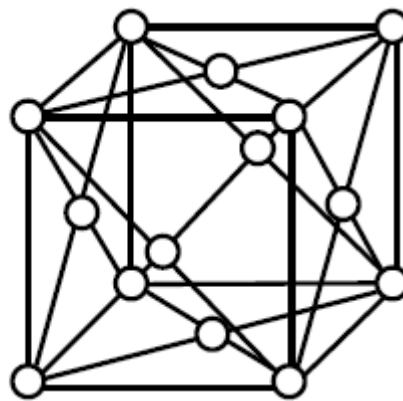
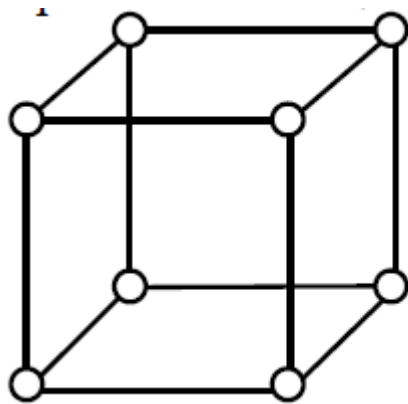
- Қатты денелер физикасында материалдың электрлік, оптикалық және жылу қасиеттерін түсіндіру үшін аймақтық (зоналық) теория қолданылады. Бұл теория кристалдық тордағы электрондардың кванттық-механикалық қозғалысын сипаттайды және өткізгіш, шалаөткізгіш және диэлектриктер арасындағы айырмашылықтарды түсіндіруге мүмкіндік береді. Қатты денелердің көпшілігі кристалдық құрылымға ие, яғни олардың атомдары кеңістікте қатаң тәртіппен, периодты түрде орналасқан. Әрбір атом өз электрондарын иеленіп, көрші атомдармен өзара әрекеттесе отырып, кристалдық тордың бөлігіне айналады. Атомдар арасындағы осындай өзара әсер — электрондардың энергетикалық деңгейлеріне тікелей әсер етеді.

Жеке атомда электрондар нақты дискретті энергетикалық деңгейлерде (қабықшаларда) орналасады. Бірақ миллиардтаған атомдардан құралған қатты денеде бұл деңгейлер бір-бірімен қабаттасып, кең энергетикалық жолақтар немесе энергетикалық аймақтар (зоналар) түзеді.



Кристалдық тор

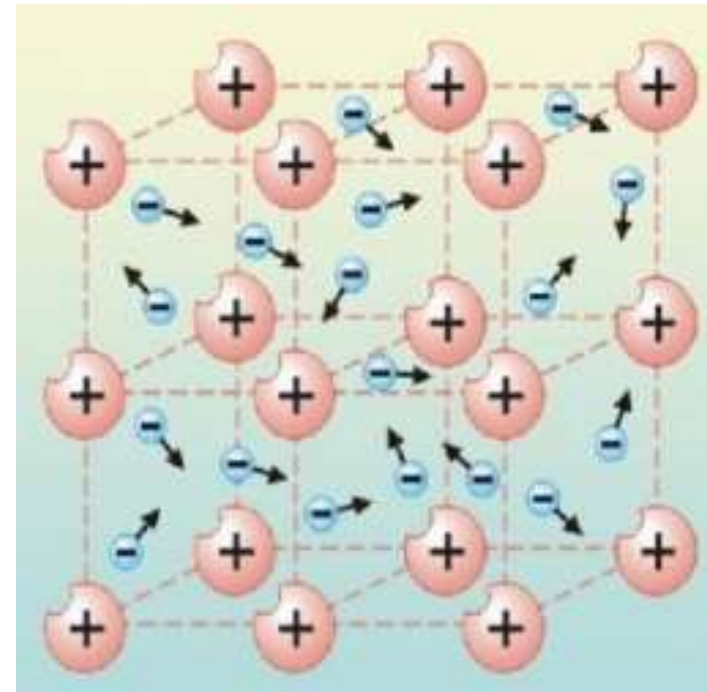
- Кристалдық тор базис деп аталатын атомдар мен молекулалардың ең аз саны бар элементар жасушалардан түзіледі.
- Базистер кеңістіктік торлардың 14 түрін құрайды, олар Бравэ торлары деп аталады.



Бравэ торлары: қарапайым куб пішінді;
беттік центрленген куб пішінді

Металдардың кристалдық құрылымы және атомаралық байланыс түрлері

- Негізгі ерекшелігі – кристалдық торда атомдардың орналасуы сирек.
- Атомдардың үлкен радиусы сыртқы валенттілік электрондарының атомдарды оңай тастап кетуіне әкеледі, ал оң зарядталған иондар кристалл торының түйіндерінде қалады, ал электрондар олардың арасында электронды газ түзеді.



Энергетикалық аймақтар (зоналар) теориясының негіздері

- Энергетикалық аймақтар теориясы (зоналық теория) — қатты денедегі электрондардың мінез-құлқын кванттық-механикалық тұрғыда сипаттайтын іргелі теория. Бұл теория кристалдық торда электрондардың қандай энергетикалық деңгейлерде бола алатынын және олардың электр тогын тасымалдауға қалай қатысатынын түсіндіруге мүмкіндік береді.

Жартылай өткізгіштердің кристалдық құрылымы және атом аралық байланыс түрлері.

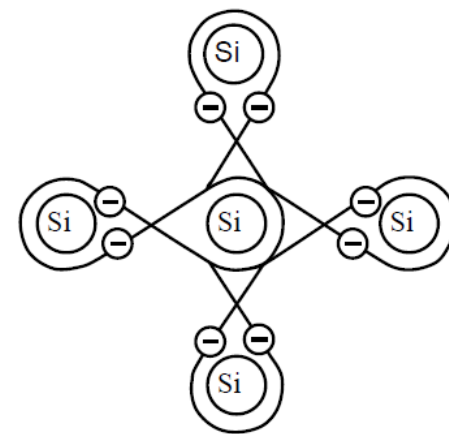
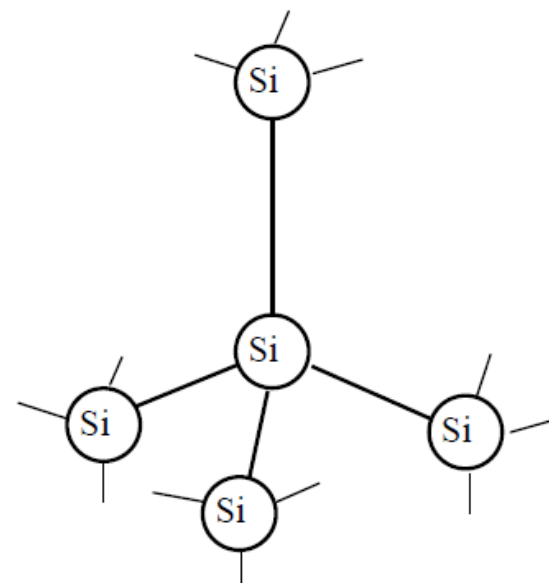
- Менделеев кестесінде III, IV, V, VI топтарында орналасқан элементтер жартылай өткізгіштерге жатады. Si, Ge, GaAs, InP, Se, Te
- Атом құрылысында ішкі электрондар бұлты және сыртқы валенттік электрондар болады.
- Валентті электрондар атом ядросымен әлсіз байланысқан, яғни электр және жылу тасымалдауға бейім.

Кремний кристалдық торы

Әрбір кремний атомы төрт көрші атоммен қоршалған және тетраэдр түзеді.

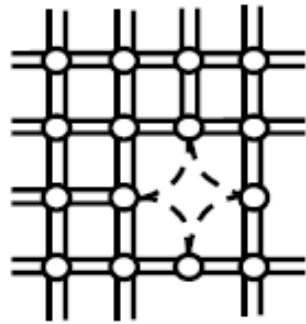
Тетраэдрдің төбелері мен оның орталығында атомдар орналасқан. Орталық атом төбелердегі қалған төрт атомнан бірдей қашықтықта орналасқан. Жоғарғы жағындағы әрбір атом, өз кезегінде, басқа төрт жақын атом үшін орталық болып табылады.

Әр атомның төрт сыртқы электроны коваленттік байланыс түзуге қатысады (әрқайсысында екі электрон).

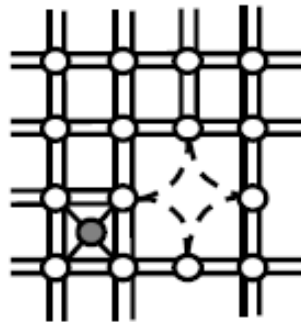


Кристалдық тордың ақаулары

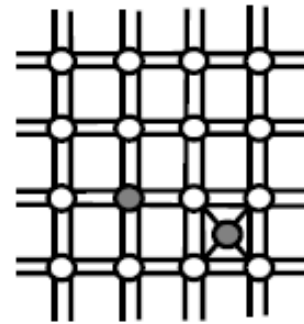
- бос түйіннің көрінісі-Шотки дефектісі
- бос түйін мен түйінаралық атомның жиынтығы – Френкель дефектісі
- қоспа атомдары дефектісі



a



б



в

Потенциалдық өріс және электрондардың қозғалысы

- Кристалдық қатты денеде атомдар кеңістікте периодты түрде орналасады. Осы атомдармен байланысқан электрондар да сол периодты құрылыммен өзара әрекеттесіп, периодты потенциал өрісінде қозғалады. Бұл жағдайда электронның кванттық қозғалысы бірөлшемді Шрёдингер теңдеуімен сипатталады: $\hat{H}\psi(r) = E\psi(r)$ мұндағы: $\hat{H}$ — Гамильтониан операторы: жүйенің толық энергиясын сипаттайды, $\psi(r)$ — электронның толқындық функциясы (мүмкін болатын координаталардағы болу ықтималдығын сипаттайды), E — электронның энергиясы, r — электронның кеңістіктегі орны. Периодты потенциал өрісі $V(r)$ шартын қанағаттандырады: $V(r+R) = V(r)$ мұндағы: R — кристалдық тордың кез келген векторы.

Блох теоремасы

Кристалдық қатты денедегі электронның қозғалысын сипаттау үшін Блох теоремасы қолданылады. Бұл теоремаға сәйкес, периодты потенциал өрісінде электронның толқындық функциясы келесідей түрде жазылады:

$$\psi_{n,k}(r)=u_{n,k}(r)e^{ik \cdot r}$$

мұндағы:

$u_{n,k}(r)$ — тордың периодына сәйкес келетін функция, яғни $u(r+R)=u(r)$,

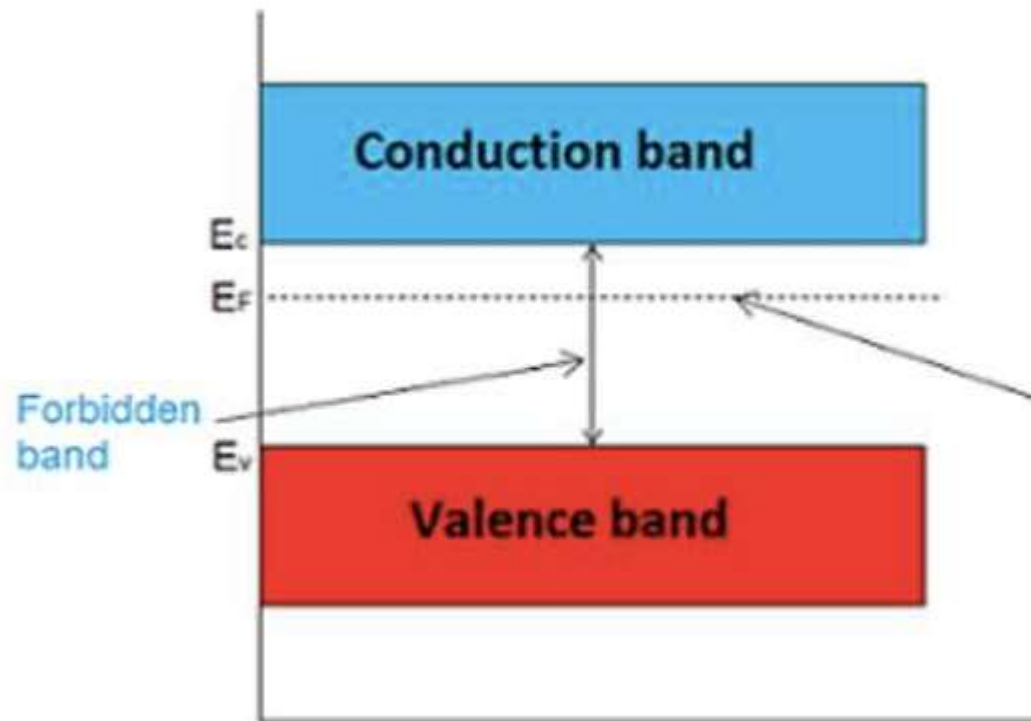
k — толқындық вектор, электронның кристалдағы квазимоментумына сәйкес келеді,

n — энергетикалық аймақтың нөмірі (мысалы, валенттік аймақ, өткізгіштік аймақ).

Бұл форма Блох функциясы деп аталады және ол электрондардың периодты ортада бос электрондар сияқты емес, бірақ толқындық қасиеттерін сақтай отырып қозғала алатынын көрсетеді.

Тыйым салынған аймақ және өткізгіштік аймағы

- Шрёдингер теңдеуінің шешімдері нәтижесінде электрондар белгілі бір энергетикалық аймақтарда ғана бола алады. Электронның кез келген энергия мәні мүмкін емес. Бұл энергетикалық құрылым келесідей сипатталады:



Валенттік аймақ (Valence Band)

- ❖ Толтырылған энергетикалық деңгейлер жиыны.
- ❖ Бұл аймақтағы электрондар атом ядросына жақын, көбіне химиялық байланыстарға қатысады.
- ❖ Электр тогын тасымалдауға қабілетті емес, себебі барлық деңгейлер толық толтырылған.

Өткізгіштік аймақ (Conduction Band)

- ❖ Электрондардың еркін қозғалуына мүмкіндік беретін бос немесе жартылай толтырылған энергетикалық деңгейлер.
- ❖ Осы аймаққа өткен электрондар электр тогын тасымалдай алады.
- ❖ Бұл аймақ валенттік аймақтың үстінде орналасады.

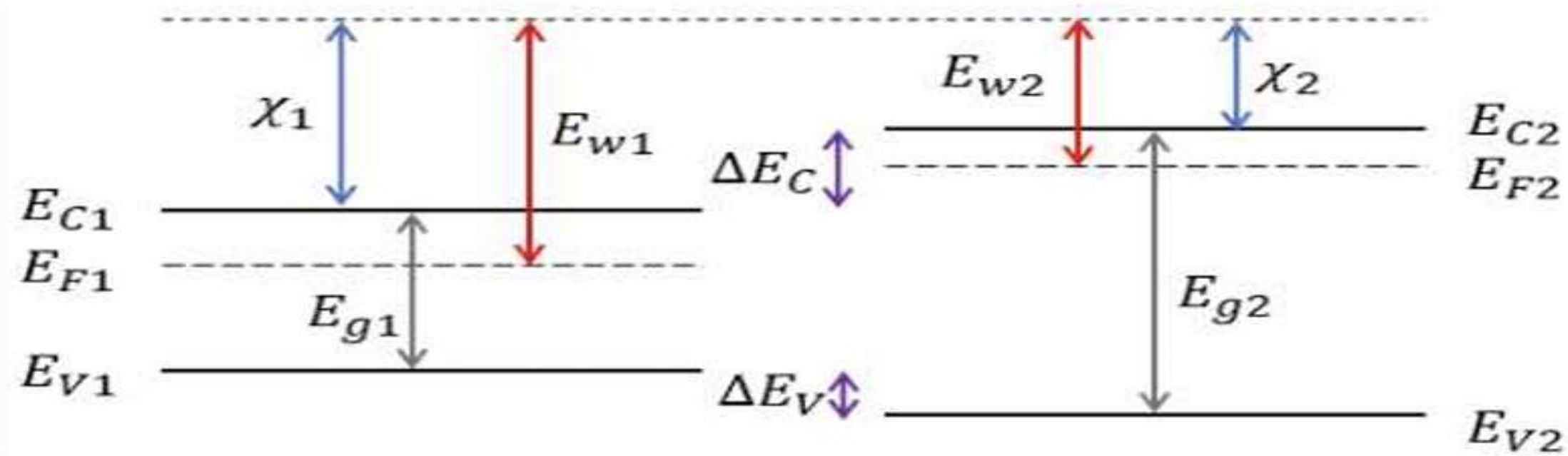
Тыйым салынған аймақ (Forbidden Band, Band Gap)

- ❖ Энергетикалық деңгейлер болмайтын аймақ.
- ❖ Электрон бұл аймақта бола алмайды.
- ❖ Оның ені E_g деп белгіленеді және материалдың қасиетіне тікелей әсер етеді:

$$E_g = E_c - E_v$$

мұндағы:

- E_g — тыйым салынған аймақтың ені (band gap),
- E_c — өткізгіштік аймақтың төменгі шекарасы,
- E_v — валенттік аймақтың жоғарғы шекарасы.



2.4. Материал түрлеріне байланысты E_g мәні

Материал түрі	E_g мәні (эВ)	Сипаттамасы
Өткізгіштер	$E_g \approx 0$	Валенттік және өткізгіштік аймақтар қабаттасады (мыс: мыс, күміс)
Шалаөткізгіштер	$0 < E_g < 3$	Аз ғана энергиямен электрондарды қоздыруға болады (мыс: кремний — 1.1 эВ, германий — 0.66 эВ)
Диэлектриктер	$E_g > 3$	Электронды қоздыру үшін өте көп энергия қажет (мыс: алмаз — 5.5 эВ)

3 Заряд тасымалдаушыларының концентрациясы

Кристалдық қатты денелерде, әсіресе шалаөткізгіштерде, тоқты электр өрісі арқылы тасымалдайтын негізгі элементтер — электрондар және кемтіктер (дырыстар). Бұл бөлшектерді жалпы заряд тасымалдаушылары деп атаймыз. Олардың концентрациясы — яғни, көлем бірлігіндегі саны — материалдың өткізгіштік қасиеттерін анықтайды.

Заряд тасымалдаушылар концентрациясы температураға, қоспалар мөлшеріне және тыйым салынған аймақтың еніне тәуелді. Төменде біз осы байланыстарды сипаттайтын негізгі теориялық негіздерді қарастырамыз.

Жартылай өткізгіштердегі заряд тасымалдаушылар статистикасы

- Кез-келген статистикалық теорияның мақсаты-тарату функциясын табу. Яғни берілген температурада термодинамикалық тепе-теңдік жағдайында T белгілі бір бөлшектің белгілі бір энергия деңгейін E алу ықтималдығына пропорционал болатын функцияны айтамыз.
- Егер классикалық (кванттық емес) жүйелер қарастырылса және бөлшектердің қандай да бір ерекше қасиеттері ескерілмесе, онда Максвелл-Больцман бөлу функциясы қолданылады:

$$f(E, T) = C e^{-\frac{E}{kT}},$$

- Тағы бір функция Ферми – Дирактың таралуын сипаттайды. Бұл толқындық функциялары екі немесе одан да көп электрондардың бір күйде болуына тыйым салатын Паули принципіне бағынатын бөлшектерге қолданылады. Бұл функция келесідей жазылады:

$$f(E,T) = \left[1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}} \right]^{-1}.$$

- Ферми-Дирактың функциясы термодинамикалық тепе-теңдік жағдайында E энергиясы бар күйдегі электрондармен толтыру ықтималдығын анықтайды.

- E_F параметрі Ферми деңгейі деп аталады, ол электрондар мен кемтіктер жүйелерінің сипаттамалық мәні болып табылады және әр жартылай өткізгіш үшін белгілі бір мәнге ие.
- $E = E_F$ кезінде $f = \frac{1}{2}$ мәнге ие. Бұл дегеніміз Ферми деңгейі осындай кванттық күйдің энергиясына сәйкес келеді, оны толтыру ықтималдығы $\frac{1}{2}$ құрайды.
- $E \gg E_F$ энергия деңгейлері бар электрондар үшін берілген өрнекті елемеуге болады, нәтижесінде бөлшектер жүйесін Максвелл – Больцман бөлу функциясымен сипаттауға болады.

- Кванттық күйлердің тығыздығын және заряд тасымалдаушылардың таралу функциясын біле отырып, олардың тиісті энергия аймақтарындағы концентрациясын есептеуге болады.
- Энергиясы E_c -ден шексіздікке дейінгі аралықта болатын n электрондарының концентрациясы төменгідей өрнекпен анықталады

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N(E) f(E, T) dE \qquad n = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} :$$

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

- Кемтіктердің концентрациясы да сол сияқты болады, бұл жағдайда валенттік аймақта бос деңгейдің пайда болу ықтималдығы $1 - f(E, T)$, ал интеграцияны $-\infty$ - ден E_V -ге дейін жүргізу керек екендігі ескеріледі :

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} N(E) [1 - f(E, T)] dE \quad p = N_V e^{-\frac{E_F - E_V}{kT}},$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

N_c және N_v -сәйкесінше өткізгіштік аймағының түбіне және валенттілік аймағының төбесіне жақын энергия деңгейлерін толтыру шегін анықтайтын тиімді күй тығыздығы.

- n және p концентрацияларының сол және оң жағын бір-біріне көбейту арқылы $E_g = E_c - E_v$ аламыз

$$np = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

Көріп отырғанымыздай, тұрақты температурада концентрациялардың көбейтіндісі тұрақты мән болып табылады, яғни біреуінің өсуі екіншісінің төмендеуіне әкеледі. Меншікті жартылай өткізгіште өткізгіштік аймақтағы қозған электрондардың саны валенттік аймақта қалған кемтіктердің санына тең. Бұл екі концентрация да меншікті концентрация деп аталады және n_i арқылы белгіленеді.

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

Меншікті концентрация температураға байланысты. Концентрация көбейтіндісін ықшам түрде төменгідей жазуға болады

$$np = n_i^2.$$

- Электрон-вольттағы энергиядан потенциалды вольтке ауысу арқылы концентрацияның қатынасын келесі түрде жазуға болады

$$n / p = e^{-\frac{(\varphi_E - \varphi_F)}{\varphi_T}}$$

- Еркін электрондардың концентрациясы арқылы Ферми деңгейі

$$\varphi_F = \varphi_E + \varphi_T \ln(n / n_i).$$

- Кемтіктердің концентрациясы арқылы Ферми деңгейі

$$\varphi_F = \varphi_E - \varphi_T \ln(p / n_i).$$

- *Тепе-теңдік жүйеде Ферми деңгейі барлық бөліктерінде бірдей, ол жүйе қаншалықты гетерогенді болса да.*

$$\varphi_F = \text{const}, \quad \text{grad}(\varphi_F) = 0.$$

Осыған орай, егер электрондардың концентрациясы координатамен өзгерсе, онда электр өрісі пайда болады

$$E = \varphi_T \frac{\partial n / \partial x}{n}$$

Қорытынды:

- Қатты денелердің аймақтық (зоналық) теориясы — заманауи материалтанудың және электрониканың негізін құрайтын іргелі ұғым. Бұл теорияның көмегімен біз кристалдық тордағы электрондардың қозғалысын, олардың энергия деңгейлерін және осы деңгейлердің периодты құрылымдағы өзгерісін түсіндіре аламыз. Шрёдингер теңдеуі мен Блох теоремасы кристалдағы электрон күйінің кеңістіктік және энергетикалық сипаттамасын анықтауға мүмкіндік береді. Энергетикалық аймақтар мен тыйым салынған зоналар ұғымдары арқылы материалдардың өткізгіштік қасиеттері — өткізгіш, шалаөткізгіш және диэлектрик болып бөлінуінің физикалық негізі ашылады. Валенттік және өткізгіштік аймақтар, сондай-ақ олардың арасындағы тыйым салынған аймақ Δ , E_g , электрондардың жылулық және сыртқы өрістер әсерінен қалай қозғалатынын анықтайды. Заряд тасымалдаушыларының концентрациясын анықтау арқылы біз нақты температурада немесе қоспалар болған жағдайда шалаөткізгіштің өткізгіштігін есептей аламыз. Бұл — шалаөткізгіш құрылғылардың (диодтар, транзисторлар, күн па

Әдебиеттер тізімі:

1. Кителл Ч. Введение в физику твёрдого тела. — М.: Наука, 1981.
2. Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid State Physics. — Saunders College Publishing, 1976.
3. Ю.А. Васильев. Физика полупроводников и диэлектриков. — М.: Высшая школа, 2002.
4. С.М. Резник. Физика твердого тела. — М.: Лань, 2015.
5. С. Хамидуллин. Жартылай өткізгіштер физикасы. — Алматы: Қазақ университеті, 2008.
6. Сейітов Ш.Ж. Қатты денелер физикасы: оқу құралы. — Алматы: Эверо, 2013.
7. Charles Kittel. Introduction to Solid State Physics (8th Edition). — Wiley, 2004.
8. S.O. Kasap. Principles of Electronic Materials and Devices (4th Edition). — McGraw-Hill, 2017.
9. Ben G. Streetman, Sanjay Banerjee. Solid State Electronic Devices (7th Edition). — Pearson, 2014.
10. Yu. M. Tsidilkovskii. Band Structure of Semiconductors. — Pergamon Press, 1982.